

В. О. Москалюк, В. І. Тимофєєв, А. В. Федяй

Надшвидкодiючi прилади електронiки

Київ – 2014

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

В. О. Москалюк
В. І. Тимофєєв
А. В. Федяй

Надшвидкодiючі прилади електронiки

Навчальний посiбник

*Рекомендовано Міністерством освіти і науки, молоді та спорту України
як навчальний посiбник для студентів вищих навчальних закладів,
які навчаються за спеціальністю «Фізична та біомедична електроніка»*

Київ
НТУУ «КПІ»
2014

УДК 621.382.3(075.8)

ББК 32.852.3я7

М82

*Рекомендовано Міністерством освіти і науки, молоді та спорту України
(Лист № 1/11-6803 від 09.04.2013 р.)*

Рецензенти:

В. І. Осінський, д-р техн. наук, проф.,
Науково-дослідний інститут мікроприладів
Національної академії наук України

С. В. Плаксін, д-р фіз.-мат. наук, проф.,
Інститут транспортних систем і технологій «Трансмаг»
Національної академії наук України

Відповідальний редактор

Ю. І. Якименко, акад. НАН України, д-р техн. наук, проф.,
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

Москалюк В. О.

М82 Надшвидкодiючі прилади електронiки: навчальний посiбник /
В. О. Москалюк, В. І. Тимофєєв, А. В. Федяй. – К. : НТУУ «КПІ»,
2014. – 528 с. – Бiблiогр. с. 497–527. – 300 пр.
ISBN 978-966-622-622-1

Розглянуто сучасні й перспективні надшвидкодiючі прилади електронiки: польові транзистори із затвором Шоттки, гетеробiполярні транзистори, транзистори з високою рухливiстю електронiв, потужні НВЧ-транзистори, резонансно-тунельні дiоди і прилади, що мiстять в активній областi нові матерiали (графен, нанотрубки). Аналізу їх роботи передує опис моделей перенесення заряду на макрорiвнi без урахування квантових ефектiв (рiвняння Больцмана, релаксацiйні рiвняння збереження, метод Монте-Карло) і з урахуванням ефектiв розмiрного квантування (метод обвiдної хвильової функцiї). Особливу увагу придiлено опису матерiалiв, використовуваних у галузi надвисоких частот, та ефектiв перенесення гарячих електронiв, що спостерiгаються в сильному електричному полi у разi зменшення характерних розмiрiв приладiв.

Для студентiв напряму «Мiкро- та наноелектронiка», також може бути корисний студентам iнших спецiальностей та аспiрантам вищих навчальних закладiв.

УДК 621.382.3(075.8)
ББК 32.852.3я7

ISBN 978-966-622-622-1

© В. О. Москалюк, В. І. Тимофєєв,
А. В. Федяй, 2014
© НТУУ «КПІ» (ФЕЛ), 2014

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА.....	5
ВСТУП.....	7
1. ЗАСОБИ МОДЕЛЮВАННЯ.....	16
1.1. МЕТОД КІНЕТИЧНОГО РІВНЯННЯ.....	16
1.1.1. Кінетичне рівняння.....	16
1.1.2. Інтеграл зіткнень.....	22
1.1.3. Наближення часу релаксації.....	25
1.1.4. Приклади розв'язку кінетичного рівняння.....	27
1.2. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО.....	34
1.3. РЕЛАКСАЦІЙНІ РІВНЯННЯ.....	41
1.3.1. Усереднення кінетичного рівняння.....	41
1.3.2. Релаксаційні рівняння.....	44
1.3.3. Міждолинна релаксація.....	46
1.4. РІВНЯННЯ ДРЕЙФОВО-ДИFUЗІЙНОЇ МОДЕЛІ.....	52
1.5. КВАНТОВІ МОДЕЛІ ПЕРЕНЕСЕННЯ ЗАРЯДУ.....	54
1.5.1. Загальні положення.....	54
1.5.2. Метод хвильових функцій.....	60
1.6. МОДЕЛЮВАННЯ СУБМІКРОННИХ СТРУКТУР.....	64
1.6.1. Задачі моделювання і типи моделей.....	65
1.6.2. Система моделювання субмікронних компонентів.....	76
2. НАПІВПРОВІДНИКОВІ МАТЕРІАЛИ.....	82
2.1. Зонна структура напівпровідників.....	82
2.1.1. Атомарні напівпровідники.....	82
2.1.2. Бінарні напівпровідники $A^{III}B^V$	88
2.1.3. Складні сполуки $A^{III}B^V$	98
2.1.4. Фононні спектри.....	100
2.2. МЕХАНІЗМИ ТА ШВИДКОСТІ РОЗСИЮВАННЯ.....	105
2.2.1. Фононне розсіювання.....	106
2.2.2. Домішкове розсіювання.....	114
2.3. СЕРЕДНІ ЧАСИ РЕЛАКСАЦІЇ.....	117
2.3.1. Часи релаксації імпульсу.....	117
2.3.2. Часи релаксації енергії, пружність розсіювання.....	121
2.4. РУХЛИВІСТЬ ЕЛЕКТРОНІВ.....	127
3. ГАРЯЧІ НОСІЇ У СИЛЬНОМУ ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ.....	138
3.1. РОЗІГРІВАННЯ ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ.....	138
3.2. НАСИЧЕННЯ ДРЕЙФОВОЇ ШВИДКОСТІ.....	151
3.3. ДИНАМІЧНА ПРОВІДНІСТЬ.....	161
3.3.1. Диференціальна провідність.....	161
3.3.2. Високочастотна провідність.....	165
3.4. «СПЛЕСК» ДРЕЙФОВОЇ ШВИДКОСТІ.....	170
3.5. ДИFUЗИЯ ГАРЯЧИХ ЕЛЕКТРОНІВ.....	176
4. СУБМІКРОННІ ПОЛЬОВІ ТРАНЗИСТОРИ.....	179
4.1. ЗАГАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ.....	179
4.2. КВАЗІДВОВИМІРНА МОДЕЛЬ ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА ШОТТКІ.....	184
4.3. СХЕМНІ МОДЕЛІ ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА ШОТТКІ.....	203
4.3.1. Малосигнальна модель.....	204
4.3.2. Шумова модель.....	208
4.4. МОДЕЛІ ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА ШОТТКІ ДЛЯ РЕЖИМУ ВЕЛИКОГО СИГНАЛУ.....	215
4.4.1. Субпороговий режим.....	216
4.4.2. Відкритий затвор.....	221
4.4.3. Інверсний режим.....	225
4.5. ДВОВИМІРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СУБМІКРОННИХ ПОЛЬОВИХ ТРАНЗИСТОРІВ ШОТТКІ.....	227
4.6. МОДЕЛЮВАННЯ ЕФЕКТІВ ТРЕТЬОГО ВИМІРУ.....	232
4.6.1. Розподілені ефекти в польовому транзисторі Шотткі.....	232
4.6.2. Аналіз польового транзистора Шотткі з розподіленими параметрами в часовій області.....	237
4.6.3. Моделювання розмірних ефектів і технологічних неоднорідностей.....	241
5. ГЕТЕРОСТРУКТУРНІ ПОЛЬОВІ ТРАНЗИСТОРИ.....	248
5.1. ЗАГАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ.....	248
5.2. КІНЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРНИХ ПОЛЬОВИХ ТРАНЗИСТОРІВ.....	252
5.3. ДВОВИМІРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРНИХ ПОЛЬОВИХ ТРАНЗИСТОРІВ.....	262

5.4. ГЕТЕРОТРАНЗИСТОРИ З ДВОМА ПОТЕНЦІАЛЬНИМИ ЯМАМИ.....	266
5.4.1. Чисельне моделювання.....	266
5.4.2. Аналітична модель статичних характеристик.....	270
5.4.3. Схемні моделі й шумові параметри.....	273
5.5. ГЕТЕРОСТРУКТУРНІ ТРАНЗИСТОРИ ІЗ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ.....	276
6. ПОТУЖНІ НАДВИСОКОЧАСТОТНІ ТРАНЗИСТОРИ.....	287
6.1. ПОТУЖНІ СУБМІКРОННІ ПОЛЬОВІ ТРАНЗИСТОРИ ШОТТКІ.....	287
6.2. ПОТУЖНІ ГЕТЕРОСТРУКТУРНІ ПОЛЬОВІ ТРАНЗИСТОРИ.....	295
6.3. ГЕТЕРОБІПОЛЯРНІ ТРАНЗИСТОРИ.....	299
6.3.1. Двовимірне моделювання транзисторів.....	300
6.3.2. Моделювання розігрівних ефектів.....	304
6.3.3. Схемотехнічне моделювання процесів саморозігрівання.....	308
6.3.4. Електротепловий аналіз монолітних інтегральних схем на субмікронних транзисторах.....	316
6.3.5. Шумові властивості субмікронних гетеробіполярних транзисторів.....	318
6.4. ПОТУЖНІ МОП-ТРАНЗИСТОРИ.....	323
7. РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИЙ ДІОД.....	332
7.1. ОСНОВНІ УЯВЛЕННЯ.....	332
7.1.1. Структурні складові резонансно-тунельного діода.....	332
7.1.2. Принцип роботи резонансно-тунельного діода.....	333
7.1.3. Методика розрахунку струму.....	337
7.2. УМОВНО-АНАЛІТИЧНІ МОДЕЛІ.....	341
7.2.1. Метод плоских хвиль.....	344
7.2.2. Використання лоренцової модельної функції.....	347
7.2.3. Напіваналітична спрощена модель резонансно-тунельного діода.....	351
7.2.4. Інші умовно-аналітичні методи.....	356
7.3. ЧИСЕЛЬНІ МОДЕЛІ.....	Ошибка! Закладка не определена.
7.3.1. Концентрація та хвильові функції.....	357
7.3.2. Вплив просторового заряду.....	364
7.3.3. Узагальнена формула Цу–Есакі.....	370
7.3.4. Розсіювання у квантовій ямі резонансно-тунельного діода.....	374
7.3.5. Вплив вторинних факторів на характеристики резонансно-тунельного діода.....	380
7.4. ДВОДОЛИННЕ МОДЕЛЮВАННЯ.....	384
7.5. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛЕЙ.....	392
8. ПЕРСПЕКТИВНІ НАНОСТРУКТУРИ І НАНОКОМПОНЕНТИ.....	401
8.1. ПОРІВНЯЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОЧАСТИНОК.....	401
8.2. НАНОКОМПОНЕНТИ З ВИКОРИСТАННЯМ ТУНЕЛЬНОГО ЕФЕКТУ.....	406
8.3. НИЗЬКОРОЗМІРНІ СТРУКТУРИ НА ОСНОВІ ГРАФЕНА.....	410
8.4. НАНОКОМПОНЕНТИ З ВИКОРИСТАННЯМ НАНОТРУБОК І НАНОПРОВІДНИКІВ.....	415
8.5. ПАСИВНІ КОМПОНЕНТИ НАНОІНТЕГРАЛЬНИХ СХЕМ: МІЖЗ'ЄДНАННЯ, ЛІНІЇ ПЕРЕДАЧІ, КОНДЕНСАТОРИ.....	422
8.6. СПІНТРОННІ СТРУКТУРИ.....	435
8.7. ЕЛЕМЕНТИ ПАМ'ЯТІ НА НАНОКОМПОНЕНТАХ.....	443
ДОДАТКИ.....	445
Додатки до розділу 2.....	445
Д2.1. Усереднення швидкостей розсіювання.....	445
Додатки до розділу 3.....	455
Д3.1. Розігрівання електронів у багатодолинних напівпровідниках.....	455
Д3.2. Високочастотна провідність.....	457
Додатки до розділу 4.....	460
Д4.1. Рівноважний стан контакту «канал–підкладка».....	460
Д4.2. Рівняння неперервності для каналу й підкладки.....	465
Д4.3. Рівняння Пуассона для каналу і підкладки.....	468
Д4.4. Рівняння збереження енергії та імпульсу для каналу і підкладки.....	470
Д4.5. Розрахунок малосигнальних параметрів.....	473
Додатки до розділу 5.....	478
Д5.1. Алгоритм чисельного моделювання гетероструктурних транзисторів.....	478
Додатки до розділу 7.....	486
Д7.1. Виведення формули Цу–Есакі.....	486
Д7.2. Скінченно-різницева схема для системи рівнянь обвідної хвильової функції.....	487
Д7.3. Рівняння, що замикають скінченно-різницеву схему.....	492
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	497

ПЕРЕДМОВА

Сучасні тенденції розвитку електроніки викликані нестримним бажанням людства підвищувати швидкодію комп'ютерів і освоювати нові інформаційні технології, покращувати якість зв'язку й передавання інформації, підвищувати надійність локаційних засобів і вирішувати все нові технічні проблеми за допомогою електронної техніки. Такі завдання вимагають відповідних швидкостей роботи активних електронних компонентів, що, у свою чергу, змушує використовувати для їх створення як нові матеріали, так і все більш тонкі фізичні ефекти. Крім того, цілком природним і необхідним виглядає й перехід від мікрометрових характерних розмірів приладів до нанометрових, які освоюються сучасною технологією. За таких розмірів дедалі помітніше проявляються квантові ефекти, які можуть бути використані для створення принципово нових приладів.

Навчальна література, особливо призначена для спекурсів, не може залишатися осторонь від рівня і тенденцій розвитку електроніки. Пропонований навчальний посібник є спробою відстежити ці тенденції й дати майбутнім фахівцям з мікро- і наноелектроніки основи знань, потрібних для розуміння фізичних процесів, особливо динамічних, що відбуваються в сучасних приладах. Автори, наслідуючи принцип «пізнання через моделювання», включили в цей посібник матеріал, оснований на власному досвіді моделювання, тому природно, що перелік розглянутих приладів не може бути повним. І тільки в деяких випадках для повноти огляду використовувалися роботи інших авторів.

Автори глибоко вдячні колективу НДІ «Сатурн», особливо В. І. Босому, А. В. Іващуку та О. Г. Максименко за багаторічну творчу співпрацю, О. М. Фалєсвій, О. В. Семеновській, М. Г. Овчарук та І. Ю. Уваровій за допомогу в проведенні розрахунків і підготовці рукопису.

Цей навчальний посiбник з однойменного курсу призначено для студентiв, якi навчаються за напрямом «Мiкро- i наноелектронiка», але автори сподiваються, що вiн буде корисним для набагато бiльшого кола читачiв.

ВСТУП

Головна тенденція у розвитку електроніки – підвищення робочих частот. Необхідна умова цього – зменшення пролітного часу електронів і, як наслідок, зменшення характерних розмірів. Сучасна мікроелектроніка з успіхом освоює субмікронні (менше 1 мкм), а в найближчому майбутньому і нанометрові (менше 0,1 мкм) технології. Не коментуючи решту напрямів розвитку (рис. В1), зазначимо, що невпинно зростає роль міждисциплінарних досліджень, що дозволяє отримувати якісно нові сполуки і структури. Попри цю тенденцію залишаються традиційними також напрями, пов'язані з підвищенням чутливості приймальних та підвищенням потужності передавальних пристроїв.

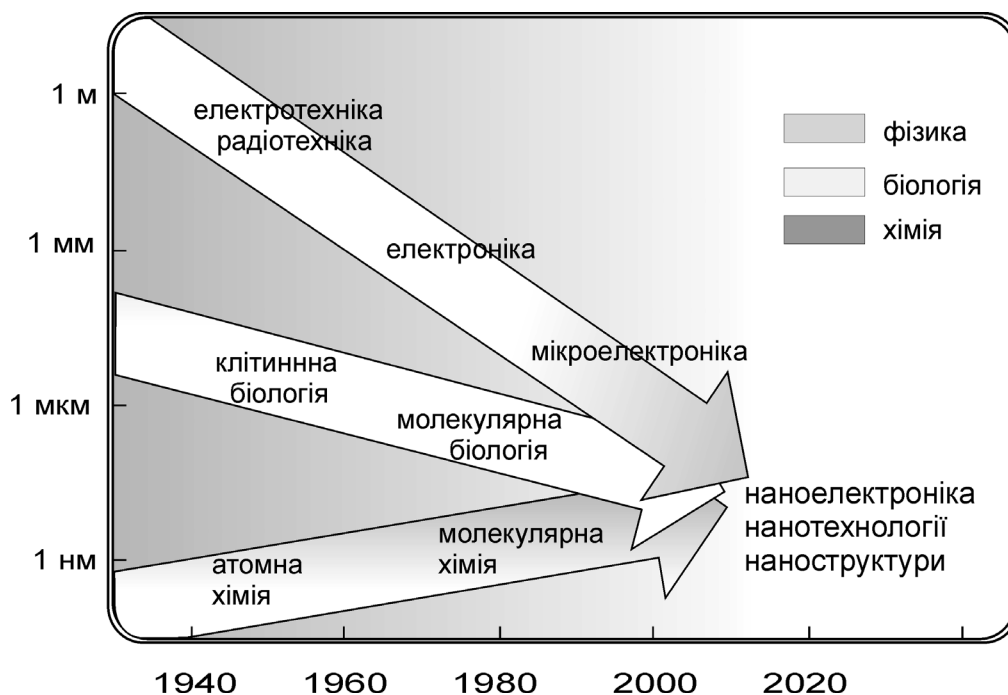


Рис. В1. Тенденції розвитку деяких галузей науки¹

Відомі декілька напрямів розвитку субмікронної і наноелектроніки – це пошук матеріалів і їх сполук із принципово новими властивостями, вдосконалення компонентів із субмікронними розмірами активних областей, зокрема гетероструктурних,

¹ Cappy A. Nanotechnology: the next industrial revolution? / A. Cappy // The Newsletter of the French National Committee for Microelectronics Education. – 2002. – N 12. – P. 4–6.

а також створення нових нанорозмiрних приладiв, пристроiв i систем.

Одним iз напрямiв пiдвищення частотних можливостей i швидкодiї електронних компонентiв є використання нових напiвпровiдникових матерiалiв. За останнi два-три десяти-лiття технологiчне освоєння арсенiду галiю iстотно потiснило кремнiєвi прилади, що панували на ринку електронної про-дукцiї, насамперед у сферi надвисокочастотних i надшвид-кодiючих приладiв. Цьому сприяла не лише вища рухливiсть електронiв, але й деякi особливостi зонної структури GaAs. Вiн, як i iншi представники групи матерiалiв $A^{III}B^V$, належить до багатодолинних напiвпровiдникiв, що мають у зонi про-вiдностi декiлька пiдзон («долин») з рiзними ефективними масами електронiв. Це зумовлює iснування ефекту вiд'ємної динамiчної провiдностi (ВДП), на якому основана дiя таких генераторiв, як дiод Ганна. З особливiстю такої зонної струк-тури, точнiше зi специфiкою мiждолинних переходiв електро-нiв, пов'язаний ефект «сплеску» дрейфової швидкостi елек-тронiв у сильному електричному полi. Цей ефект належить до квазiбалiстичних явищ i дозволяє отримувати пiкосе-кундний iмпульс струму як реакцiю на увiмкнення напруги, що створює сильне (1...100 кВ/см) електричне поле. З арсенi-дом галiю також пов'язане створення польових транзисторiв iз затвором у виглядi бар'єра Шоттки (ПТШ), гетероструктур-них польових транзисторiв з високою рухливiстю електронiв, бiполярних транзисторiв, монолiтних iнтегральних схем рiз-ного призначення i гетеролазерiв. Такий широкий спектр створених приладiв зумовлений, зокрема, використанням по-трiйних i четверних сполук, якi можна розглядати як сплави простих бiнарних напiвпровiдникiв $A^{III}B^V$ (AlGaAs, AlGaAsSb, InGaAs i багато iнших). Варiюючи їх стехiометричний склад, можна отримувати матерiали з прогнозованими параметрами.

Нові можливості надає технологічне освоєння у виробництві електронних компонентів нітриду галію. Характерними тут є темпи його використання для створення приладів (рис. В2), які до того ж мають тенденцію до збільшення, про що свідчить збільшення кількості публікацій у науковій літературі.

Попри майже на порядок меншу рухливість, ніж в арсеніді галію, нітрид галію має більшу швидкість насичення, що дозволяє отримувати вищу густину струму, а наявність істотно більшої критичної напруженості електричного поля зумовлює можливість створення приладів більшої потужності (рис. В3).

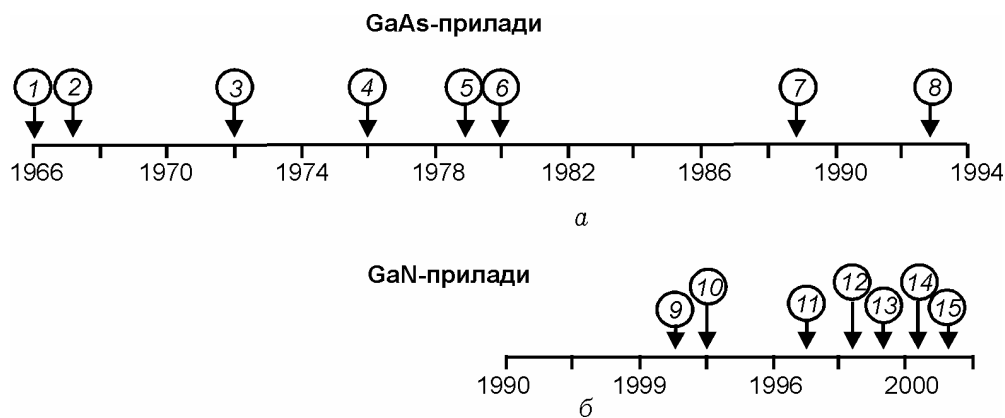


Рис. В2. Хронологія створення приладів на арсеніді й нітриді галію²:
 а – GaAs-прилади: 1 – перший GaAs ПТШ; 2 – перший GaAs ПТШ НВЧ-діапазону; 3 – перший GaAs-підсилювач Х-діапазону; 4 – перша GaAs НВЧ МІС Х-діапазону; 5 – 400 мВт НВЧ МІС Х-діапазону; 6 – перший *HEMT*; 7 – НВЧ МІС Х-діапазону з ККД 30 %; 8 – 4,5 Вт НВЧ МІС Х-діапазону на *FET*;
 б – GaN-прилади: 9 – перші GaN ПТШ та *HEMT*; 10 – перші GaN ПТШ та *HEMT* НВЧ-діапазону; 11 – 1,4-Вт *HEMT* на 4 ГГц; 12 – 9-Вт *HEMT* на 7,5 ГГц; 13 – перший GaN підсилювач НВЧ на *HEMT*; 14 – 51-Вт *HEMT* на 6 ГГц (імпульсний); 15 – перша GaN НВЧ МІС на *HEMT*

Прилади на основі нітриду галію у наш час розглядають як одні з найперспективніших у таких сферах електроніки, як світловипромінювальні прилади короткохвильової області спектра, «сонячно сліпі» ультрафіолетові фотоприймачі, потужні швидкодіючі транзистори для мобільних телекомунікаційних систем та в інших.

² В. Данилин. Транзисторы на GaN пока самый крепкий орешек / В. Данилин, Т. Жукова // Электроника: наука, технологии, бизнес. – 2005. – Т. 26. – Вып. 4. – С. 20–28.

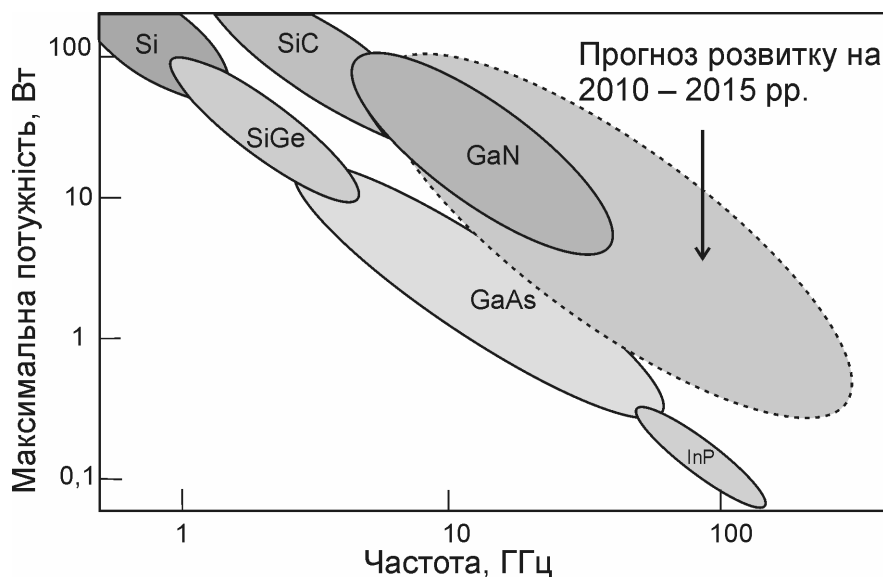


Рис. В3. Залежність максимальної потужності від частоти для приладів на основі різних напівпровідникових матеріалів. Прогноз побудовано на основі роботи³ та розрахунків розд. 3

Нітриди III групи (GaN, InN, AlN) і потрійні сполуки на їх основі формують групу широкозонних матеріалів з унікальними властивостями, які є перспективними для різних приладів як оптоелектроніки, так і суто електронного призначення, що зумовлено насамперед меншою ймовірністю утворення дефектів в ідеальній структурі нітридів, ніж у ґратках арсенідів і фосфідів через більш сильний зв'язок атомів металів з атомами азоту, ніж з атомами арсену і фосфору. Це сприяє покращенню експлуатаційних параметрів приладів на основі нітридів: довговічності, вихідної потужності, робочої частоти, термічної, механічної, радіаційної та хімічної стабільності, швидкодії й напруги живлення.

Розвиток технологій і нові можливості зі створення субмікронних компонентів та інтегральних схем (ІС) на їх основі передбачають удосконалення наявних і створення нових компонентів, адаптованих до діапазонів надвисоких (НВЧ) і вкрай високих частот (КВЧ), які можуть досягати граничних частот до 500 ГГц.

³ Нанотехнологии в электронике / Под. ред. А. Чаплыгина. – М.: Техносфера, 2005. – 488 с.

У сучасних електронних системах використовується широкий спектр інтегральних схем, виконаних на напівпровідникових сполуках $A^{III}B^V$ і $A^{II}B^{VI}$. Це пов'язано переважно з приладами на польових транзисторах із затвором Шотткі – ПТШ (*MESFET*–*Metal Semiconductor Field Effect Transistor*) і польових транзисторах з керуючим p – n -переходом (*Junction FET*). Дедалі більше визнання отримують ІС на субмікронних гетероструктурних біполярних транзисторах (субмікронних ГСБТ; *HBT* – *Hetero Bipolar Transistor*), на транзисторах з високою рухливістю електронів або гетероструктурних польових транзисторах (ГСПТ; *HEMT* – *High Electron Mobility Transistor*) і псевдоморфних гетеротранзисторах (*pHEMT*) та метаморфних гетеротранзисторах *mHEMT*. Такі прилади широко використовують у телекомунікаційних системах, стільниковій телефонії, комп'ютерних мережах передавання даних, космічних системах, системах локації та ін. Порівняно новими сферами їх застосування є високошвидкісна обчислювальна техніка і волоконно-оптичний зв'язок. Субмікронні ПТШ і гетероструктурні транзистори використовують зазвичай у малопотужних і малошумлячих колах, а гетеробіполярні транзистори – у потужних колах посилення і генерації.

На відміну від ПТШ, в якому модуляції провідності досягають за рахунок зміни товщини провідного каналу, в гетеротранзисторі модуляція провідності здійснюється унаслідок зміни поверхневої густини електронів на межі гетеропереходу. Основними завданнями вдосконалення технології ІС на субмікронних гетеротранзисторах є зменшення кількості дефектів, збільшення концентрації двовимірного електронного газу, збільшення рухливості електронів у двовимірному електронному газі, забезпечення однорідності його характеристик. Вдосконалення технології гетеробіполярних транзисторів, окрім цього, пов'язане з отриманням тонких (менше 0,1 мкм) багат шарових високолегованих (понад 10^{19} см^{-3}) структур.

Псевдоморфні гетеротранзистори характеризуються тим, що замість з'єднання алюмінію й арсенiду галію в них використовується гетероперехід на основі сполуки InGaAs і підкладка з фосфiду iндiю. Це приводить до збільшення розриву зон на межі гетеропереходу більш ніж у два рази, що сприяє нейтралізації паразитного каналу в шарі під затвором, а також збільшенню дрейфової швидкості та рухливості електронів, а отже, збільшенню швидкодiї й граничних частот. Крім того, *pHEMT* більш потужні, оскільки InP має більшу теплопровiдність, ніж GaAs. У підкладці з фосфiду iндiю забезпечується велика густина двовимірного електронного газу, що дозволяє отримувати вищу густину струму. До недоліків *pHEMT* слід віднести складність виготовлення і високу вартість. Подальша оптимізація структури гетеротранзистора пов'язана з появою *mHEMT*, в яких для зменшення розузгодження кристалічних ґраток гетерошарів і арсенiдгалієвої підкладки (що є головною перешкодою для отримання високоякісних структур) використовується багат шарова варизонна система буферних шарів AlGaAsSb. Розвиток технології виготовлення структур на нiтриді галію сприяв створенню *HEMT* на AlGaN/GaN, які поступаються за частотними і підсилювальними властивостями транзисторам на сполуках $A^{III}B^V$, але iстотно перевершують їх за густиною струму, потужності та робочою напругою.

Розвиток сучасних гетеротранзисторних структур зумовлений як використанням багатодолинних напівпровiдникових матеріалів, так і досягненнями технології зі створення багат шарових наноструктур. Підвищення швидкодiї транзисторів може бути також пов'язане зі створенням структур із субмікронними поздовжніми і нанометровими поперечними розмірами, зокрема багат шаровими наноструктурами низької розмірності^{4; 5}, наприклад, гетеротранзисторами з двома гетеропереходами. Характерні розміри затвора таких гетероструктурних

⁴Sadofyev G. Yu. New approach to the independent ohmic contact formation in the structures with two parallel isotype quantum wells / Yu. G. Sadofyev et. al. // Journal of Vacuum Science and Technology B. – 2000. – N 18 (3). – P. 1668–1671.

⁵Chu R. AlGaIn-GaN Double-Channel HEMTs / R. Chu et. al. // IEEE Transactions On Electron Devices. – 2005. – Vol. 52. – N 4. – P. 438–445.

транзисторів становлять 0,1...0,2 мкм з розмірами високолегованих шарів в активній області транзистора менше 0,1 мкм. Показано⁶, що середні значення дрейфової швидкості у такій структурі вищі, ніж в ГСПТ з однією потенціальною ямою, при цьому транзистори з двома гетеропереходами мають вищі значення струму і потужності. Нині розміри гетеропереходів у двоканальному транзисторі наближаються до 3 нм на основі сполуки InGaN.

Передавачі для авіаційних застосувань і звичайні радары, що використовують дзеркальні антени, де необхідної вихідної потужності досягають підсумовуванням потужностей декількох транзисторів, висувають строгі вимоги до характеристик використовуваних транзисторів⁷:

- значне посилення (4...6 і більше паралельно використовуваних транзисторів);
- стійкість до розузгодження для запобігання виходу транзистора з ладу під час налаштування;
- низький рівень паразитної генерації у разі розузгодження навантаження;
- фазова стабільність, що має величезний вплив на доплерівську чутливість системи в цілому.

Система на фазованих антенних ґратках висуває до транзисторів схожі вимоги, за винятком того, що посилення може бути нижчим, оскільки у передавачі не використовується складання потужностей. Кремнієвий біполярний транзистор є «робочою конячкою» усіх сучасних радарних розробок з частотами до 3,5 ГГц. У типовій схемі кремнієвий біполярний транзистор з посиленням 9 дБ і потужністю 110 Вт «розгойдує» ще шість таких самих транзисторів для отримання потужності 600 Вт. У роботі⁸ розглянуто приклад створення підсилювача, в якому кремнієвий біполярний транзистор з посиленням 7,5 дБ

⁶Liu J. DC and RF Characteristics of AlGaIn-GaN/InGaIn/GaN Double-Heterojunction HEMTs / J. Liu et. al. // IEEE Transactions On Electron Devices. – 2007. – Vol. 54. – N 1. – P. 2–10.

⁷Технология мощных СВЧ LDMOS-транзисторов для радарных передатчиков L-диапазона и авиационных применений. Компоненты и технологии. – № 10. – 2007. – С. 14–16.

⁸Murae T. High Power S-Band Solig-State Amplifiers for Surveillance and Traffic Control Radars / T. Murae, K. Fujii, T. Matsuno // IEEE MTT-S. – 2001. – Vol. 2. – P. 653–656.

і потужністю 150 Вт «розгойдує» ще чотири таких самих прилади для досягнення вихiдної потужності 550 Вт у діапазоні частот 2,7...2,9 ГГц.

Під впливом ринку безпровiдних комунікацій і його вимог до лiнійності підсилювальних пристроїв технологія виробництва потужних *LDMOS*-транзисторів (*Laterally Diffused Metal Oxide Semiconductors*) за останні роки розвивалась надзвичайно iнтенсивно. Особливо яскраво це демонструють транзистори для діапазону 2,1 ГГц, призначені для базових станцій: прилади подiбного класу мають густину потужності 0,9 Вт/мм за посилення 16,5 дБ і пiкової ефективності 62 %⁹. При цьому кожне нове покоління *LDMOS*-транзисторів має кращі характеристики порiвняно з попереднім. Усе це дозволяє зробити висновок, що *LDMOS* – досить надійна і вiдпрацьована технологія, що за багатьма параметрами не поступається бiполярній, а iноді й перевершує її. На вiдмiну від бiполярних транзисторів, *LDMOS* – вiдносно молода технологія, яка розвивалась переважно у кінці 80-х – на початку 90-х рокiв ХХ століття і стала ключовою на ринку базових станцій. Завдяки вищому посиленню, кращій ефективності й, найголовніше, набагато вищій лiнійності, до середини 90-х рокiв *LDMOS* стала провiдною технологією на ринку пристроїв з високою лiнійністю, повністю замiнивши бiполярну. За розвитку технології *LDMOS* оптимізацію конструкції транзистора і бiльшість досліджень було спрямовано на досягнення бiльшої лiнійності пристроїв¹⁰.

Прикладом розвитку технологій виготовлення гетероструктур до розмірів багат шарових надграток є сучасні резонансно-тунельні діоди (РТД). Нещодавно було продемонстровано застосування РТД для різних цілей в електроніці:

⁹Brech H. Record Efficiency and Gain at 2,1 GHz of High Power RF Transistor for Cellular and 3G Base Stations / H. Brech, W. Brakensienk, D. Burdeaux et. al. // IEEE IEDM. – 2003. – P. 15.1.1–15.1.4.

¹⁰Brech H. Voltage Optimization for State of the Art RF-LDMOS for 2,1 GHz W-CDMA Cellular Infrastructure Application / H. Brech, W. Burger, C. Dragon et. al. // IEEE MTT-S. – 2003. – Vol. 1. – P. 205–212.

створення цифро-аналогових перетворювачів (ЦАП), задавальних генераторів, регістрів зсуву та статичних запам'ятовувальних пристроїв з довільною вибіркою (ЗПДВ) із наднизьким споживанням енергії¹¹. Резонансно-тунельні діоди можуть бути виготовлені для більш високопродуктивних ЦАП, ніж інші пристрої на основі комплементарних структур «метал-оксид-напівпровідник». Вони покривають частотний діапазон 10...100 ГГц та споживають менше енергії, ніж наявні ЗПДВ¹². Діапазон застосування РТД в електронних пристроях НВЧ та КВЧ діапазонів весь час розширюється. Наприклад, у результаті виконання дослідницької програми DARPA's Ultra Electronics Program (США) було створено суматори в гігагерцовому діапазоні частот та показано можливість інтеграції для створення базових елементів, необхідних для суматорів, сигнальних процесорів та кіл з багатозначною логікою. Було продемонстровано 4-бітні ЦАП частотою 2 ГГц, АЦП частотою 3 ГГц, тактові генератори, регістри зсуву, а також статичні ЗПДВ зі споживанням енергії 50 нВт/біт¹³.

Завдяки високій швидкості процесу тунелювання РТД мають потенціал до підвищення частотного діапазону. У 2010 р. було продемонстровано роботу GaInAs/AlAs РТД як генератора сигналів частотою 1,04 ТГц та потужністю 7 мкВт¹⁴.

¹¹*Figueiredo M. L.* Ultralow voltage resonant tunnelling diode electroabsorption modulator / M. L. Figueiredo, C. N. Ironside, C. R. Stanley // *Journal of Modern Optics*. – 2002. – Vol. 49. – P. 939–945.

¹²*Technology Roadmap for Nanoelectronics* / Editor: R. Compano. – Second Edition. – Belgium, 2000. – 104 p.

¹³*Roco M. C.* Nanotechnology Research Directions: IWGN Workshop Report. Vision for Nanotechnology R&D in the Next Decade / M. C. Roco, S. Williams, P. Alivisatos. – London: Kluwer Academic Publishers, 1999. – 318 p.

¹⁴*Suzuki S.* Fundamental oscillation of resonant tunneling diodes above 1 THz at room temperature / S. Suzuki, M. Asada, M. Teranish et. al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2010. – Vol. 97. – P. 242102-1–3.

1. ЗАСОБИ МОДЕЛЮВАННЯ

Найбільш точні кількісні моделі електронних процесів за наявності зовнішніх впливів, зокрема й динамічних, можуть бути створені на основі *кінетичного рівняння*. Воно у загальному випадку являє собою інтегро-диференціальне рівняння, за допомогою якого може бути знайдена функція розподілу частинок, а отже, й усі *середні* величини, що характеризують поведінку колективу частинок.

1.1. МЕТОД КІНЕТИЧНОГО РІВНЯННЯ

1.1.1. Кінетичне рівняння

Для аналізу нерівноважних процесів, що відбуваються у напівпровідниках, наприклад у сильних електричних полях, під час освітлення, у разі інжекції носіїв через контакти, недостатньо енергетичної функції розподілу $N(E)$, що використовується для розрахунку рівноважних концентрацій. Більш повно відображає стан електронного колективу функція $N(\vec{r}, \vec{k}, t)$, що подібно до $N(E)$ може бути подана у вигляді добутку функції густини \vec{k} -станів $g(k) = dn_c/dV_k$ і функції $f(E(\vec{k})) = dn/dn_c$, що характеризує ймовірність заповнення станів, причому зв'язок $E(\vec{k})$ визначається законом дисперсії для електронів у певній речовині. Функція густини станів може бути обрана у вигляді $g(k) = 2V/(2\pi)^3$, якщо залишаються справедливими основні висновки зонної теорії. Функція $f(E(\vec{k}))$ також найчастіше може бути взята у вигляді, подібному до рівноважної функції Фермі–Дірака, однак величини, що входять до неї, набувають трохи іншого змісту.

У результаті динамічного впливу відбувається зміна \vec{k} -станів електронів, а їхня енергія стає функцією часу $E(\vec{k}(t))$. Просторово неоднорідну нерівноважність можна описати

за допомогою введення *локальної температури* $T_e(\vec{r})$, що у загальному випадку різна для електронів і дірок й до того ж не обов'язково збігається з температурою речовини або навколишнього середовища. У деяких випадках, звичайно у разі відхилення концентрації нерівноважних носіїв від рівноважних значень, локальну нерівноважність описують за допомогою введення *квазірівнів Фермі* $E_{fn}(\vec{r})$ для електронів й $E_{fp}(\vec{r})$ для дірок, які виступають як формальні параметри функції Фермі–Дірака.

У підсумку стає можливим описувати нерівноважність електронного колективу за допомогою функції розподілу

$$N(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{d^2 N}{dV \cdot dV_k} = \frac{g(k)}{\exp\{[E(\vec{k}(t)) - E_{fn}(\vec{r})] / k_B T_e(\vec{r})\} + 1}. \quad (1.1)$$

Функція (1.1) нормується так, що її інтегрування за всім геометричним об'ємом V і за об'ємом k -простору V_k дає повну кількість частинок певного вигляду в певному колективі:

$$\int_V dV \int_{V_k} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k = N. \quad (1.2)$$

Надалі обмежимося розглядом одиничного об'єму $V = 1$, вибираючи функцію густини станів у вигляді $g(k) = 1/4\pi^3$ [1].

Знання функції розподілу дозволяє знайти основні макроскопічні характеристики колективу. Наприклад, інтегрування її за всім k -простором дає розподіл концентрації частинок у геометричному просторі:

$$n(\vec{r}, t) = \int_{V_k} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k, \quad (1.3)$$

і відповідно розподіл густини об'ємного заряду $\rho(\vec{r}, t) = -en(\vec{r}, t)$.

Усередненням швидкості в k -просторі за функцією розподілу можна знайти середню дрейфову швидкість спрямованого руху частинок:

$$\vec{v}_{dp}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \int_{V_k} \vec{v} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k, \quad (1.4)$$

а отже, й розподіл густини струму:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -e n(\vec{r}, t) \vec{v}_{\text{др}}(\vec{r}, t) = -e \int_{V_k} \vec{v} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k. \quad (1.5)$$

Так можна знайти і локальне середнє значення $\varphi_{\text{ср}}(\vec{r}, t)$ будь-якої фізичної величини, оскільки

$$\varphi_{\text{ср}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n} \int_{V_k} \varphi(\vec{k}) N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k = \frac{(n\varphi)_{\text{ср}}}{n}. \quad (1.6)$$

Тут необхідно звернути увагу на вибір меж інтегрування. В інтегралах (1.2)–(1.6), записаних для загального випадку, інтегрування проводиться за всіма можливими значеннями хвильового вектора. Для електронів у періодичному полі кристалічної ґратки областю неповторюваних значень квазіхвильового вектора є зона Бріллюена V_B , причому інтегрувати треба за станами, що відповідають одній енергетичній зоні. Більше того, іноді інтегрують за якою-небудь характерною ділянкою дисперсійної кривої, визначаючи концентрацію або середні значення для частинок того чи іншого виду. Так, наприклад, можуть бути знайдені концентрація й параметри електронів у Γ -, L - або X -долині зони провідності, «легких» або «важких» дірок у валентній зоні.

Кінетичне рівняння ґрунтується на тому, що в замкненій системі кількість частинок зберігається незмінною, тобто $N = \text{const}$,

$$\frac{dN(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt} = 0. \quad (1.7)$$

Більш строго рівняння (1.7) можна довести на основі теореми Ліувілля, розглянутої у статистичній механіці. Співвідношення (1.7) є основою для формулювання *кінетичного рівняння*, що дозволяє знайти зміну функції розподілу за заданого впливу на частинки. Зазначимо, що кінетичне рівняння записують звичайно окремо для колективів частинок різного виду (електронів певної зони, дірок, фононів та ін.).

Розглянемо це рівняння для електронів. Оскільки $N(\vec{r}, \vec{k}, t)$ – функція трьох змінних, дві з яких векторні, то $dN = (\partial N / \partial t)dt + (\partial N / \partial \vec{r})d\vec{r} + (\partial N / \partial \vec{k})d\vec{k}$, або

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dt}. \quad (1.8)$$

Тут для стислості запису позначено:

$$\frac{\partial N}{\partial \vec{r}} = \vec{e}_x \frac{\partial N}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial N}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial N}{\partial z} = \text{grad}_r N; \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial N}{\partial \vec{k}} = \vec{e}_x \frac{\partial N}{\partial k_x} + \vec{e}_y \frac{\partial N}{\partial k_y} + \vec{e}_z \frac{\partial N}{\partial k_z} = \text{grad}_k N. \quad (1.10)$$

З огляду на те, що $d\vec{r}/dt = \vec{v}$, а $d\vec{k}/dt = \vec{F}/\hbar$, запишемо співвідношення (1.7) у вигляді

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \left(\vec{v} \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{\hbar} \left(\vec{F} \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} \right) = 0. \quad (1.11)$$

Сили, що діють на електрони, можна умовно поділити на дві групи: 1) сили зовнішніх полів $\vec{F} = -e(\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) + [\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}, t)])$, які змінюються у просторі порівняно плавно; 2) сили, які виникають між двома частинками у разі достатнього їх зближення, або локальних порушень періодичності кристалічної ґратки. Незважаючи на те, що такі взаємодії мають також електричну природу, через їхню локальність вони розглядаються як зіткнення або *співударання*. Залишаючи в третьому доданку співвідношення (1.11) лише силу зовнішніх полів, можна записати

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c, \quad (1.12)$$

де права частина, називана *інтегралом зіткнень*, символічно враховує вплив останніх на функцію розподілу. Оскільки густина станів $g(k)$ постійна у k -просторі, то, розділивши всі

доданки на $g(k) = 1/4\pi^3$, отримаємо найпоширенішу форму запису кінетичного рівняння для функції $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = 4\pi^3 \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c. \quad (1.13)$$

Якщо другий і третій доданки перенести у праву частину, то отримаємо більш наочну форму запису кінетичного рівняння з огляду на його фізичний зміст: зміна функції розподілу в певній точці можлива за рахунок просторової неоднорідності розподілу (наявність градієнтів концентрації, температури), впливу зовнішніх полів і зіткнень, тому часто відповідні доданки називають дифузійним, польовим і таким, що характеризує вплив співударянь.

Характерним прикладом використання кінетичного рівняння є слабо іонізована газова плазма або електронно-діркова плазма в невідроджених напівпровідниках. У цих випадках кінетичне рівняння називають *рівнянням Больцмана*. Якщо зіткненнями можна знехтувати, що добре виконується, наприклад, для дуже розрідженої газової плазми або для електронних потоків у вакуумі, то $[\partial N / \partial t]_c = 0$ й рівняння (1.13) називають *рівнянням Власова*.

Кінетичне рівняння є дуже потужним засобом *статистичного опису* поведінки великих колективів частинок, тому що отримувана в результаті його розв'язання функція розподілу дозволяє досить детально аналізувати фізичні процеси перенесення носіїв в електронних приладах. За своєю природою кінетичне рівняння – класичне, але надаючи тим чи іншим величинам відповідного квантового змісту, можна отримати *напівкласичний* опис фізичних процесів з урахуванням квантових ефектів.

Кінетичне рівняння дозволяє стежити за зміною функції розподілу за тих чи інших умов, а конкретний вид функції визначається статистичними властивостями колективу частинок.

Розглянемо, наприклад, рівноважний стан колективу, в якому функція розподілу f_0 має бути стаціонарною ($\partial f_0 / \partial t = 0$) і зіткнення не повинні змінювати її вигляду [$\partial N / \partial t]_c = 0$). За цих умов кінетичне рівняння набуває вигляду

$$\vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial \vec{k}} = 0. \quad (1.14)$$

Оскільки f_0 залежить від \vec{k} не явно, а через закон дисперсії $E(\vec{k})$, і з огляду на те, що групова швидкість електрона $\vec{v} = (\partial E / \partial \vec{k}) / \hbar$, то $\partial f_0 / \partial \vec{k} = (\partial f_0 / \partial E) \cdot (\partial E / \partial \vec{k}) = \hbar \vec{v} (\partial f_0 / \partial E)$, і рівняння набуде вигляду

$$\vec{v} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} \right) + \vec{F} \vec{v} \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) = 0. \quad (1.15)$$

Цікаво, що $\vec{F} \vec{v} = -e(\vec{\mathcal{E}} + [\vec{v} \times \vec{B}]) \vec{v} = -e\vec{\mathcal{E}} \vec{v}$, і тому магнітне поле безпосередньо не впливає на вигляд рівноважної функції розподілу. Крім того, рівноважний стан можливий за наявності статичного електричного поля, але функція розподілу має бути просторово неоднорідною, причому ця неоднорідність пов'язана тільки із просторовим розподілом потенціалу $V(\vec{r})$ або потенціальної енергії $U(\vec{r}) = -eV(\vec{r})$, тому що $\partial f_0 / \partial \vec{r} = (\partial f_0 / \partial U)(\partial U / \partial \vec{r}) = (\partial f_0 / \partial U) \text{grad} U = -(\partial f_0 / \partial U) \vec{F}$. У цьому випадку рівняння (1.15) перетворюється на рівність $\partial f_0 / \partial E - \partial f_0 / \partial U = 0$, що можливо, якщо аргументом функції розподілу буде сума $(E(\vec{k}) + U(\vec{r}))$, на відміну від функції (1.1), де аргументом служить тільки енергія $E(\vec{k})$. Такий випадок можливий, коли розглядається «викривлення» енергетичних зон у зовнішньому або контактному електричному полі, яке не порушує рівноважного стану, й відбувається просторовий перерозподіл носіїв відповідно до потенціального рельєфу [1]. Рівність нулю суми дифузійного й польового доданків у рівнянні (1.14) означає, що дифузійне перенесення носіїв, який виникає через наявність

градієнта функції розподілу, урівноважується дрейфовим рухом в електричному полі, причому ця рівновага буде локальною, що виконується для кожної точки простору.

1.1.2. Інтеграл зіткнень

Для розв'язання кінетичного рівняння в конкретній ситуації необхідно задати розподіл сил, що діють на частинки, й описати процеси зіткнень, які приводять до зміни електронних станів. У загальному випадку під дією локальних електричних полів, створюваних дефектами кристалічної ґратки, відбувається розсіювання носіїв заряду, тобто в процесі зіткнення змінюється й координата \vec{r} електрона, і його хвильовий вектор \vec{k} . Однак якщо вважати, що зіткнення відбуваються миттєво, то їх результатом є зміна лише \vec{k} -станів, а разом з ними й енергетичних станів, що задаються законом дисперсії $E(\vec{k})$. Між тим, просторовий розподіл частинок під час миттєвих зіткнень не змінюється.

Для встановлення загальної форми запису інтеграла зіткнень підрахуємо зміну загальної кількості частинок за рахунок зіткнень в якій-небудь точці k -простору. Для цього позначимо ймовірність переходу електрона за 1 с із заповненого стану \vec{k} у вільний стан \vec{k}' (рис. 1.1) через $w_{kk'}$. Якщо початковий стан \vec{k} заповнений з імовірністю $f(\vec{k})$, а кінцевий стан \vec{k}' вільний з імовірністю $(1 - f(\vec{k}'))$, то результуюча ймовірність такого переходу буде дорівнювати добутку $w_{kk'}f(\vec{k})(1 - f(\vec{k}'))$, відповідно ймовірність зворотних переходів – $w_{k'k}f(\vec{k}')(1 - f(\vec{k}))$. Якщо в околі точки \vec{k}' вибрати елементарний об'єм $dV_{k'}$, кількість станів в якому $dN_c = g(k')dV_{k'}$, то пропорційно їм збільшиться кількість переходів між станом \vec{k} і \vec{k}' -станами в об'ємі $dV_{k'}$. У підсумку повну зміну кількості частинок у розглянутому

\vec{k} -стані за одиницю часу в результаті обміну з усіма іншими станами можна знайти інтегруванням за всіма \vec{k}' -станами:

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_c = \int_{V_{k'}} g(\vec{k}') \left[w_{k'k} f(\vec{k}') (1 - f(\vec{k})) - w_{kk'} f(\vec{k}) (1 - f(\vec{k}')) \right] dV_{k'}. \quad (1.16)$$

Звідси з урахуванням сталості функції $g(k)$ можна подати праву частину кінетичного рівняння (1.13) у вигляді інтеграла, що зазвичай символічно позначають $(\partial f / \partial t)_c$,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c &= \left(\frac{\partial N / \partial t}{g(k)}\right)_c = \\ &= \int_{V_{k'}} \left[w_{k'k} f(\vec{k}') (1 - f(\vec{k})) - w_{kk'} f(\vec{k}) (1 - f(\vec{k}')) \right] dV_{k'}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

У результаті кінетичне рівняння стає інтегро-диференціальним рівнянням відносно функції розподілу $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$.

Насамперед зазначимо, що є багато різних механізмів розсіювання і, якщо окремі акти зіткнень відбуваються випадково й незалежно один від одного, їх імовірності підсумовуються:

$$w_{kk'}^\Sigma = \sum_i w_{kk'}^i. \quad (1.18)$$

Отже, у правій частині кінетичного рівняння має стояти сума інтегралів, що відповідають різним видам зіткнень.

У рівноважному стані «прихід» і «відхід» частинок для кожного \vec{k} -стану врівноважуються, й підінтегральний вираз у (1.17) дорівнює нулю, тому

$$\begin{aligned} w_{kk'} f(\vec{k}) (1 - f(\vec{k}')) &= \\ &= w_{k'k} f(\vec{k}') (1 - f(\vec{k})). \end{aligned} \quad (1.19)$$

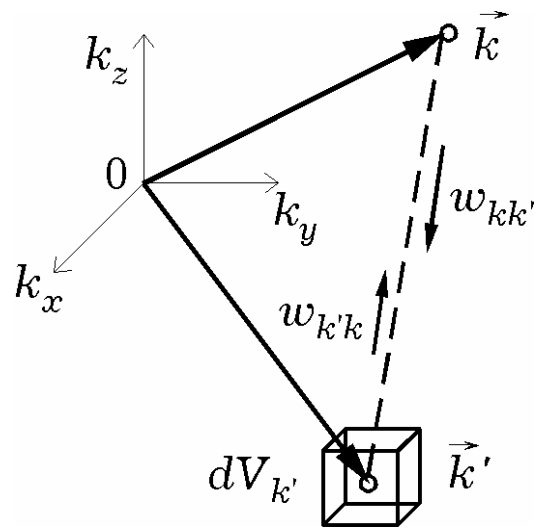


Рис. 1.1. Зображення переходів між k - і k' -станами.

Вибором елементарного об'єму в околі k' -стану й наступним інтегруванням по всьому k' -простору досягається підрахунок зміни кількості частинок в обраному k -стані за рахунок обміну з усіма станами

Підставляючи у вираз (1.19) явний вигляд функції $f(\vec{k}) = f(E(\vec{k}))$ у вигляді функції Фермі–Дірака, неважко отримати

$$\frac{w_{k'k}}{w_{kk'}} = \exp \left[\frac{(E'(k') - E(k))}{k_B T} \right]. \quad (1.20)$$

Це важливе в теорії квантових переходів співвідношення, яке іноді називають *принципом детальної рівноваги*, означає, зокрема, що $w_{kk'} > w_{k'k}$, якщо $E'(k') > E(k)$, тобто більш імовірними є переходи зі зменшенням енергії. Більша ймовірність переходів з \vec{k}' у \vec{k} компенсується меншою заселеністю \vec{k}' -станів з більшою енергією, і в результаті кількість переходів між будь-якою парою станів \vec{k} й \vec{k}' «туди» й «назад» однакова.

Інтеграл зіткнень у формі (1.17) отримано для виродженого колективу частинок. Принцип Паулі враховано в ньому наявністю співмножників $(1 - f(k))$ і $(1 - f(k'))$, які фактично забороняють переходи у вже заповнені стани. Для невироджених колективів $f(k) \ll 1$ й інтеграл зіткнень можна подати простіше:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \int_{V_{k'}} \left[w_{k'k} f(\vec{k}') - w_{kk'} f(\vec{k}) \right] dV_{k'}. \quad (1.21)$$

Відповідно в рівноважному стані

$$w_{k'k} f(\vec{k}') = w_{kk'} f(\vec{k}). \quad (1.22)$$

Але при підстановці в останню рівність функції розподілу Максвелла–Больцмана у вигляді $f(E(k)) = \exp[(E_\phi - E(k))/k_B T]$ виходить те саме співвідношення (1.20), що й для виродженого колективу. Зокрема, для *пружних* зіткнень, що відбуваються без зміни енергії ($E' = E$), імовірності прямих і зворотних переходів однакові:

$$w_{kk'} = w_{k'k}. \quad (1.23)$$

Іноді саме цю рівність використовують як формулювання принципу детальної рівноваги, однак вона є окремим випадком співвідношення (1.20), придатним лише для переходів між станами з однаковою енергією.

1.1.3. Наближення часу релаксації

Істотно спростити вигляд інтеграла зіткнень, а отже й кінетичного рівняння, можна, якщо використати *наближення часу релаксації*. Його суть полягає в припущенні того, що зміна функції розподілу за час dt пропорційна значенню цієї функції й, природно, інтервалу dt :

$$dN = \frac{N(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\tau} dt. \quad (1.24)$$

Коефіцієнт пропорційності τ , що стоїть у знаменнику, має розмірність часу й називається *часом релаксації*. За фізичним змістом й величиною час релаксації близький до середнього часу вільного пробігу в одночастинковій моделі дрейфу, тому величина $1/\tau$ визначає ймовірність того, що за одиницю часу частинка матиме зіткнення, а ймовірність зіткнень за час dt дорівнює dt/τ . Між тим, ймовірність зіткнення дорівнює відношенню кількості часток, що мали зіткнення за час dt , до загальної кількості частинок dN/N . Рівність цих значень і становить суть припущення (1.24). Воно також означає, що розподіл електронів через якийсь час порядку τ не залежить від виду нерівноважної функції розподілу безпосередньо перед зіткненнями, частинки після зіткнення «забувають» про свої первісні стани. Тому саме зіткнення, хаотизуючи рух, підтримують термодинамічну рівновагу, а вся інформація про нерівноважний стан у результаті зіткнень втрачається.

Відповідно до припущення (1.24) за одиницю часу з \vec{k} -стану в будь-які інші переходить $N(\vec{r}, \vec{k}, t)/\tau$ частинок. Але це та сама кількість, що визначається другим доданком в інтегралі зіткнень у формі (1.16), тому

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t} \right)_c = \frac{N(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\tau} = g(\vec{k}) \int w_{k'} f(\vec{k}) (1 - f(\vec{k}')) dV_{k'}. \quad (1.25)$$

Перший доданок в (1.16) характеризує кількість частинок, що переходять у стан \vec{k} у результаті зіткнень з будь-яких

\vec{k}' -станів за одиницю часу. Відповідно до наближення (1.24) це саме значення дорівнює N_0/τ , тому

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_c^+ = \frac{N_0}{\tau} = g(\vec{k}) \int w_{k'k} f(\vec{k}') (1 - f(\vec{k})) dV_{k'}. \quad (1.26)$$

Зазначимо, що в останньому виразі стоїть локально рівноважна функція розподілу N_0 , оскільки у стан \vec{k} частинки переходять безпосередньо в результаті зіткнень, які хаотизують рух і сприяють релаксації розподілу до рівноважного стану. З виразів (1.25) і (1.26) впливає вираз для інтеграла зіткнень у наближенні часу релаксації:

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_c = \frac{N_0 - N}{\tau} = g(\vec{k}) \frac{f_0 - f}{\tau}, \quad (1.27)$$

і кінетичне рівняння (1.13) у цьому наближенні набуває вигляду

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = - \frac{f - f_0}{\tau}, \quad (1.28)$$

де $f_0 = N_0/g(k)$ – рівноважна функція розподілу Фермі–Дірака.

Обґрунтованість наближення часу релаксації не завжди очевидна. Зазвичай ним користуються за порівняно невеликих відхилень від положення рівноваги, коли час релаксації можна вважати постійною величиною. Однак цей метод може мати переваги й у тих випадках, коли час релаксації є функцією енергії E , а значення $\tau(E(k))$ можуть бути заздалегідь визначені експериментально або обчислені. Останнє можна зробити на основі співвідношення (1.25), якщо відомі ймовірності переходів $w_{kk'}$. Оскільки в співвідношенні (1.25) інтегрування виконується за штрихованими змінними, то $f(k)$ можна винести за знак інтеграла й отримати

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \int w_{k'k} (1 - f(\vec{k}')) dV_{k'}. \quad (1.29)$$

Для невиродженого колективу частинок $f(k) \ll 1$ і підінтегральний вираз спрощується

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} \equiv \lambda(\vec{k}) = \int w_{k'k} dV_{k'}. \quad (1.30)$$

Надалі замість зворотного часу релаксації буде зручно використовувати поняття *швидкості розсіювання* $\lambda(\vec{k})$, що також має значення середньої частоти зіткнень.

1.1.4. Приклади розв'язку кінетичного рівняння

Статична провідність. Як приклад використання наближення часу релаксації розглянемо поведження функції розподілу електронів в електричному полі. За його відсутності розподіл хвильових векторів і відповідно швидкостей електронів буде рівноймовірним в усіх напрямках (рис. 1.2, а) і їхня сумарна швидкість дорівнюватиме нулю, а функція розподілу буде рівноважною й симетричною відносно початку координат. Обчислення густини струму з виразу (1.5) через усереднення швидкості за функцією розподілу також дає нульовий результат.

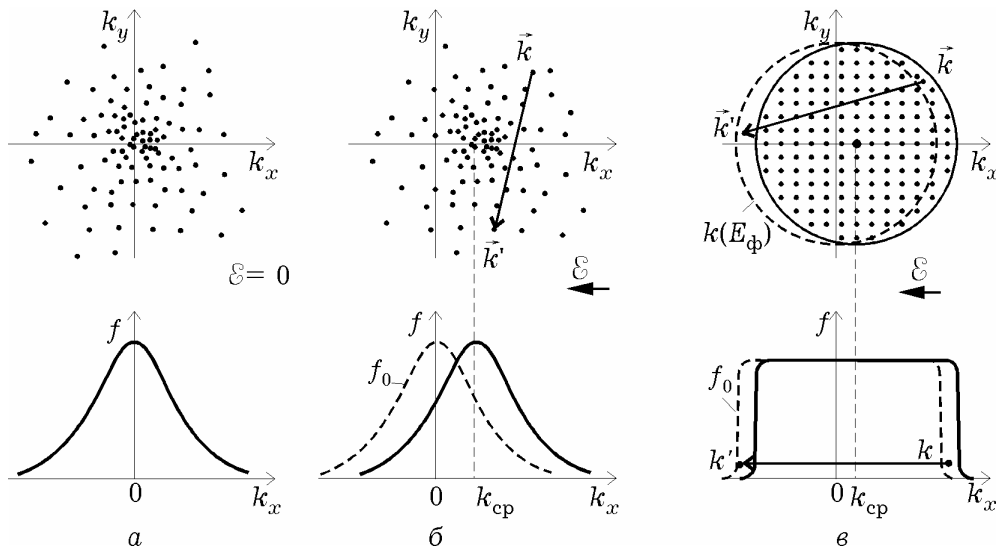


Рис. 1.2. Поведження функції розподілу в електричному полі

За відсутності електричного поля (рис. 1.2, а) рівноймовірний розподіл хвильових векторів (угорі) спричиняє симетричний характер функції розподілу. В електричному полі (рис. 1.2: б – для невиродженого колективу частинок; в – для виродженого) зсув хвильових векторів у напрямку дії сили й розсіювання електронів у випадкові стани врівноважуються за деякої зміщеної функції розподілу. Зазначимо, що в невиродженому

колективі (б) розсіювання зумовлює перехід електрона (стрілка) практично в будь-який стан, а у виродженому (в) – лише в незаповнені стани поблизу енергії Фермі.

За наявності електричного поля, спрямованого назустріч осі x , електрони прискорюються й усі точки у верхній частині (рис. 1.2, б, в), що зображують миттєві значення швидкості електронів, будуть із часом рівномірно зміщуватися в напрямку дії сили поля. У момент зіткнення швидкість електронів стає випадковою й точки на рисунку «перескакують» у випадкові місця (приклад відповідного переходу позначений стрілкою). Такі процеси приводять до двох протилежних тенденцій: під дією електричного поля функція розподілу зміщується вправо, а зіткнення, хаотизуючи рух електронів, прагнуть повернути функцію розподілу до рівноважного стану. Очевидно, що в стаціонарному стані ці дві тенденції зрівноважують одна одну за деякої зміщеної функції $N = N_0 + \Delta N$ й $f = f_0 + \Delta f$. Усереднення швидкості за формулою (1.4) дає значення швидкості дрейфу, причому внесок у значення інтеграла дає тільки $\Delta N = g(k)\Delta f$. Відповідно й густина струму визначається також нерівноважним доданком Δf :

$$\vec{j}(\vec{r}) = -e \int \vec{v} \Delta N(\vec{r}, \vec{k}) dV_k = -e \int \vec{v} g(\vec{k}) \Delta f(\vec{r}, \vec{k}) dV_k. \quad (1.31)$$

Для знаходження нерівноважної частини функції розподілу скористаємося рівнянням (1.28), що за умови стаціонарності ($\partial f / \partial t = 0$), просторової однорідності поля ($\mathcal{E} = \text{const}$) й однорідності колективу ($\partial f / \partial \vec{r} = 0$), набуває вигляду

$$\frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = -\frac{\Delta f}{\tau}. \quad (1.32)$$

Оскільки функція розподілу f залежить від хвильового вектора через закон дисперсії $E(\vec{k})$, то $\partial f / \partial \vec{k} = (\partial f / \partial E)(\partial E / \partial \vec{k}) = \hbar \vec{v} (\partial f / \partial E)$. Тут використано співвідношення (1.22), що визначає швидкість електрона із закону дисперсії. Якщо функція розподілу не дуже сильно відрізняється від рівноважної ($\Delta f \ll f_0$), що спостерігається в слабких електричних полях,

то в лівій частині рівняння (1.32) можна знехтувати членами другого порядку малості й вважати, що $\partial f / \partial E \approx \partial f_0 / \partial E$. Тоді за $\vec{F} = -e\vec{\mathcal{E}}$

$$\frac{e\vec{v}\vec{\mathcal{E}}f_0}{\partial E} = \frac{\Delta f}{\tau}. \quad (1.33)$$

Звідси й знаходимо значення нерівноважної частини функції розподілу в стаціонарному стані:

$$\Delta f_{\text{ст}} = \frac{e\tau\vec{v}\vec{\mathcal{E}}\partial f_0}{\partial E}. \quad (1.34)$$

Зазначимо, що вираз (1.33) не зміниться й тоді, коли сила в (1.32) включає й силу Лоренца $\vec{F}_\perp = -e[\vec{v} \times \vec{B}]$, тому що $\vec{v}[\vec{v} \times \vec{B}] = 0$. Це означає, що наявність магнітного поля безпосередньо не впливає на функцію розподілу.

У підсумку густина струму (1.31) у слабкому електричному полі, як і очікувалося, пропорційна напруженості поля:

$$\vec{j} = -e^2\vec{\mathcal{E}} \int \tau v^2 g(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} dV_k. \quad (1.35)$$

Надалі зручно перейти від інтегрування за k -простором до інтегрування за енергією, використовуючи співвідношення $g(k)dV_k = g(E)dE$, де $g(E)$ при квадратичному законі дисперсії може бути обрана у формі $g(E) = 4\pi(2m_d^* / h^2)^{3/2} (E - E_m)^{1/2}$ [1].

Крім того, оскільки в (1.34) входить скалярний добуток $\vec{v}\vec{\mathcal{E}}$, в (1.35) замість v^2 треба брати квадрат швидкості руху в напрямку вектора електричного поля. Тому $m^* v^2 / 2 = E / 3$ й

$$\vec{j} = -e^2\vec{\mathcal{E}} \int_0^\infty \frac{2\tau}{3m^*} E g(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} dE. \quad (1.36)$$

Інтегрування треба проводити за бажаною зоною, починаючи відлік від її дна. Якщо, наприклад, зона провідності включає кілька долин з еліпсоїдальними ізоенергетичними поверхнями, по-різному орієнтованими відносно напрямку вектора електричного поля, то інтеграл буде складатися із суми

інтегралів за кожною долиною. Це дозволить ефективну масу вважати постійною для кожної долини (у межах квадратичності закону дисперсії) і винести її за знак інтеграла. Якщо вважати, що час релаксації не залежить від енергії, що цілком припустимо у слабких електричних полях, то підінтегральний вираз, що залишився, можна подати у вигляді $F(E)df_0$ і використати формулу інтегрування за частинами:

$$\int_0^{\infty} F(E) df_0 = F(E) f_0 \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} f_0 dF = - \int_0^{\infty} f_0(E) g(E) dE.$$

Перший доданок дорівнює нулю, тому що на дні зони $g(E) = 0$, а зі збільшенням енергії $f_0(\infty) \rightarrow 0$. Другий доданок набуває зазначеного вигляду внаслідок того, що $dF/dE = g(E)$, а він дорівнює рівноважній концентрації електронів.

У підсумку для однодолинної моделі зонної структури спостерігається пряма пропорційність між густиною струму й напруженістю електричного поля, відома як закон Ома:

$$\vec{j} = \left(\frac{e^2 n \tau}{m^*} \right) \vec{\mathcal{E}} = \sigma \vec{\mathcal{E}}. \quad (1.37)$$

За наявності декількох долин загальний струм складається із внесків електронів кожної долини зі своїми параметрами τ і m^* . Іноді вдається зберегти загальний вигляд виразу (1.37), використовуючи замість m^* деяку усереднену за різними долинами ефективну масу, яку називають *омічною*.

Нестационарна динаміка дрейфу. Омічна залежність між струмом і полем (1.37) отримана для стаціонарного стану. Зі зміною напруженості електричного поля спостерігаються перехідні процеси, які також можна досліджувати за допомогою кінетичного рівняння у формі (1.28). Приймаючи, як і раніше, умову просторової однорідності електричного поля і функції розподілу й заміняючи третій доданок у лівій частині (1.28) на $\Delta f_{\text{ст}}/\tau$ згідно з (1.34), отримаємо

$$\frac{\partial(\Delta f)}{\partial t} + \frac{\Delta f}{\tau} = \frac{\Delta f_{\text{ст}}}{\tau}. \quad (1.38)$$

Якщо увімкнути електричне поле в момент часу t_0^+ (рис. 1.3), спостерігається поступовий перехід з рівноважного стану $\Delta f(t_0^+) = 0$ у стаціонарний стан $\Delta f(\infty) = \Delta f_{\text{ст}}$ відповідно до розв'язку (1.38):

$$\Delta f(t) = \Delta f_{\text{ст}} \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{t - t_0^+}{\tau} \right] \right\}. \quad (1.39)$$

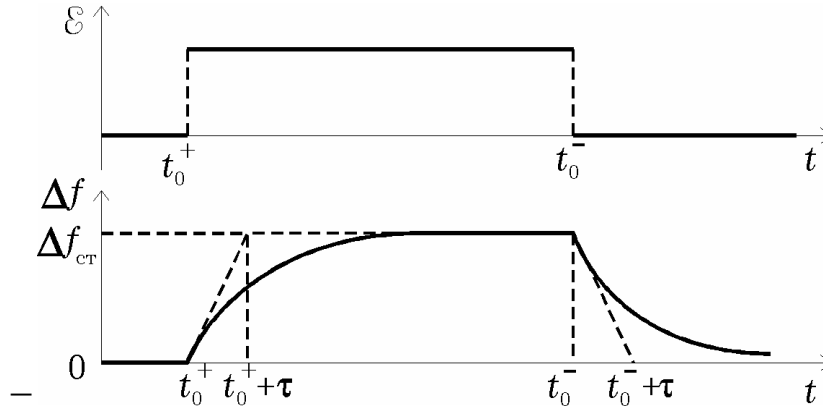


Рис. 1.3. Перехідні процеси зміни нерівноважної частини функції розподілу електронів і густини їх струму у разі вмикання й вимикання електричного поля.

Похилі штрихові лінії – дотичні до кривих у моменти t_0^+ й t_0^-

Після вимикання поля ($\mathcal{E} = 0$) кінетичне рівняння (1.28) для нерівноважного доданка Δf набуде вигляду

$$\frac{\partial(\Delta f)}{\partial t} + \frac{\Delta f}{\tau} = 0. \quad (1.40)$$

Якщо вимикання поля відбулося в стаціонарному стані (рис. 1.3) у момент t_0^- , тобто $\Delta f(t_0^-) = \Delta f_{\text{ст}}$, то розв'язком рівняння (1.40) буде функція

$$\Delta f(t) = \Delta f_{\text{ст}} \exp \left[-\frac{t - t_0^-}{\tau} \right], \quad (1.41)$$

яка показує, що після вимикання поля відбувається *релаксація*, тобто повернення функції розподілу до рівноважного стану.

Подібно до нерівноважного доданка до функції розподілу з часом змінюються дрейфова швидкість і густина струму. Значення струму, обумовлене законом Ома (1.37), досягається

не миттєво після вмикання електричного поля, так само як і зникає після його вимикання. Інерційність цього процесу визначається часом, необхідним для здійснення зіткнень усіма частинками, у результаті чого повинна відбутися така хаотизація станів, що відповідає рівноважній функції розподілу. Середнє значення цього часу й дорівнює часу релаксації τ . Формально, як це видно з рис. 1.3, за час τ закінчувалися б перехідні процеси, якби їхня швидкість залишалася такою самою, як і спочатку. Насправді час установлення стаціонарного або рівноважного стану беруть рівним $(3...5)\tau$. Характерні значення часу релаксації $10^{-12}...10^{-14}$ с приблизно рівні часу вільного пробігу в одночастинковій моделі дрейфу.

Розглянемо одну особливість релаксації функції розподілу, характерну для вироджених колективів (див. рис. 1.2, в). На відміну від невироджених, де ймовірність заповнення станів дуже мала й можливі переходи (див. рис. 1.2, б) фактично у будь-які стани, у вироджених колективах усі стани всередині ізоенергетичної поверхні Фермі заповнені й переходи туди заборонені принципом Паулі. Тому за релаксації розподілу в результаті зіткнень будуть переважати переходи зі станів \vec{k} , близьких до $\vec{k}(E_F)$, де електрони прискорюються електричним полем, у стани \vec{k}' , також близькі до $\vec{k}(E_F)$, але такі, де електрони гальмуються (див. рис. 1.2, в). Тому в релаксації беруть участь лише електрони у станах поблизу поверхні Фермі й відповідно у виразі (1.37) треба використовувати час релаксації $\tau(E_F)$ саме для цієї групи електронів.

Високочастотна провідність. Якщо електричне поле, що діє на електрони, змінне й змінюється за законом $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_m \exp(i\omega t)$, то у функції розподілу від часу за таким же законом буде змінюватися тільки нерівноважний доданок $f(t) = f_0 + \Delta f \exp(i\omega t)$. Природно, що це твердження можна вважати прийнятним для слабкого електричного поля, коли $\Delta f \ll f_0$.

За таких саме припущень про просторову однорідність поля й колективу частинок, що й у статичному полі, кінетичне рівняння набуває вигляду

$$i\omega\Delta f - \frac{e\vec{\mathcal{E}}_m}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial \vec{k}} = -\frac{\Delta f}{\tau} \quad (1.42)$$

і може бути подане в такій самій формі, що й рівняння (1.32), якщо замінити величину τ на $\tau_\omega = \tau/(1 + i\omega\tau)$. Тому й усі висновки, отримані для постійного поля, можуть бути використані для випадку змінного поля, якщо скористатися цією заміною.

Між струмом і напруженістю поля зберігається пропорційна залежність, однак коефіцієнт пропорційності, тобто питома електропровідність σ_ω , стає комплексною величиною, що залежить від частоти за таким саме законом, що й час релаксації τ_ω ,

$$\sigma_\omega = \frac{\sigma}{1 + i\omega\tau} = \frac{\sigma(1 - i\omega\tau)}{1 + \omega^2\tau^2} = \sigma' - i\sigma'' \quad (1.43)$$

Комплексний характер величини σ_ω означає, що між змінами струму й поля є фазове запізнювання на величину $\arctg\omega\tau$. Цей фазовий зсув зумовлений, однак, не інерційністю, пов'язаною з масою частинок, а статистичним характером їх зіткнень. Проявляється цей ефект на частотах, період коливань яких порівнянний з часом релаксації ($\omega\tau \sim 1$). За менших частот протягом напівперіоду поля встигає встановлюватися значення нерівноважного доданка до функції розподілу, як і у статичному полі (1.34). На високих частотах, крім зазначеного фазового зсуву, за час прискорювального напівперіоду поля доданок Δf не встигає досягти цього стаціонарного значення й густина струму зменшується відповідно до зменшення питомої електропровідності $|\sigma_\omega| = \sigma/\sqrt{1 + \omega^2\tau^2}$.

Ще одна цікава особливість пов'язана з уявною частиною σ_ω . Розглянемо рівняння Максвелла $\text{rot } \vec{H} = \partial \vec{D}/\partial t + \vec{j}$, що у комплексній

формі може бути подане у вигляді $\text{rot } \vec{H} = (\omega\epsilon\epsilon_0 + \sigma' - i\sigma'')\vec{E}$. Звідси легко бачити, що уявна частина електропровідності σ'' відіграє таку ж роль, як і діелектрична проникність, що може помітно позначатися на оптичних властивостях речовини. Однак якщо перший доданок являє собою струм зміщення, що має ємнісний характер, то третій доданок, пов'язаний з інерційністю процесів релаксації й пропорційний σ'' , має індуктивний характер.

1.2. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

Метод Монте-Карло являє собою чисельну реалізацію розв'язання кінетичного рівняння. У загальному випадку цією назвою позначають значну групу обчислювальних методів, що використовують випадкові числа. Стосовно електроніки цей метод, який іноді називають *методом частинок* [6], використовують для моделювання колективних ефектів перенесення зарядів у різноманітних плазмових (твердотільних або газових) структурах через поведження окремих частинок: їхній балістичний рух на вільному пробігу й розсіювання після зіткнень. Відомі два різновиди методу Монте-Карло: одночастинковий і багаточастинковий.

В одночастинковому методі [3] моделюється рух однієї частинки протягом проміжку часу, досить довгого для надійного статистичного усереднення. У багаточастинковому методі розглядається поведження великої кількості частинок, а розподіли параметрів, що цікавлять (енергії, швидкості, концентрації і под.), знаходять усередненням за ансамблем випадкових реалізацій цих параметрів. Досить надійною для усереднення вважається кількість частинок порядку $10^4 \dots 10^5$. Очевидно, що для застосування одночастинкового методу зовнішні умови, тобто діючі сили, мають зберігатися постійними протягом усього обчислювального експерименту, тому

він придатний для аналізу кінетичних ефектів лише в статичних полях.

Для аналізу динамічних процесів необхідно використовувати *багаточастинковий* метод Монте-Карло. У ньому, як зазначалося, електронна плазма в напівпровіднику уявляється деяким ансамблем модельованих частинок, кількість яких істотно менша, ніж реальних. Рух частинок моделюється напівкласичними рівняннями руху [1]

$$\frac{\hbar d\vec{k}}{dt} = \vec{F}; \quad (1.44, a)$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_k E(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \left(\vec{e}_x \frac{\partial E}{\partial k_x} + \vec{e}_y \frac{\partial E}{\partial k_y} + \vec{e}_z \frac{\partial E}{\partial k_z} \right) \quad (1.44, б)$$

у реальному й \vec{k} -просторах. Вплив просторового заряду враховують, розв'язуючи узгоджено з рівняннями руху рівняння Пуассона. Роль періодичного електричного поля кристалічної ґратки проявляється через закон дисперсії $E(\vec{k})$ з відповідними ефективними масами. Під час руху частинки взаємодіють із фононами, дефектами ґратки й іншими носіями, що приводить до зміни їх хвильових векторів й енергії. Ці ефекти враховують як дискретні й миттєві зіткнення, у результаті яких вільний пробіг закінчується розсіюванням.

Основою побудови алгоритму моделювання є часова діаграма (рис. 1.4), що являє собою відрізки τ_i вільного руху одного електрона в зовнішньому полі, обмеженому моментами зіткнень. Ця діаграма накладається на шкалу (звичайно рівномірну) часових інтервалів T , через які відбувається перерахунок сил, що діють на частинки, і фіксується стан частинок.

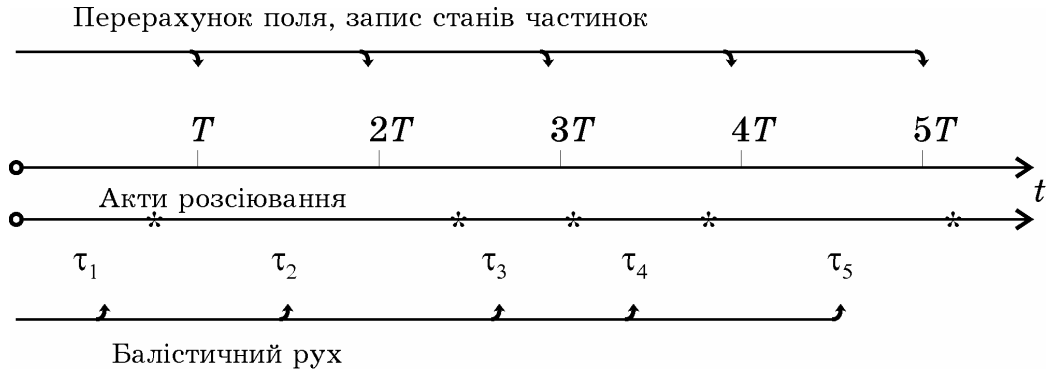


Рис. 1.4. Характерні часові моменти в багаточастинковому методі Монте-Карло: шкала моментів перерахунку поля й запису станів частинок і шкала моментів актів розсіювань, між якими моделюється вільний рух частинок

Час вільного пробігу частинок τ_i визначається як випадкова величина відповідно до відомого закону розподілу за швидкістю розсіювання $\lambda(\vec{k})$ [3; 6]. Оскільки для різних видів зіткнень швидкість розсіювання λ_i різна (див. розд. 2), то заздалегідь потрібно визначити вид розсіювання також як випадкову величину з імовірністю, пропорційною швидкості відповідного виду розсіювання. У результаті акту розсіювання змінюються величина й напрямок хвильового вектора відповідно до їх закону розподілу, а потім частинка продовжує балістичний рух до кінця часового інтервалу T .

Типовий алгоритм кінетичного моделювання можна подати в такий спосіб. Спочатку задають конфігурацію приладу, профілі легування, закон дисперсії й параметри зонної структури для певного матеріалу, вибирають функцію розподілу $N(\vec{r}, \vec{k}, 0)$, тобто задають початковий розподіл електронів – як просторовий, так і за \vec{k} -станами. Крім того, необхідно розподілити електрони по долинах пропорційно густині станів у них. Оскільки для розрахунку сил, що діють на частинки, необхідно розв'язати рівняння Пуассона, визначаючи потенціали у вузлах деякої просторової сітки, то, знаючи розподіл частинок у просторі й «розмазуючи» їх тим або іншим способом у певній локальній області, знаходять розподіл густини заряду. Вибираючи

метод чисельного інтегрування, для прискорення процедури розв'язання варто враховувати сильну розрідженість матриці відповідної системи алгебричних рівнянь.

Після знаходження розподілу електричного поля розв'язують рівняння руху по черзі для кожної частинки протягом її вільного пробігу τ_i , або, якщо вона не зіштовхується на цьому часовому кроці, то протягом інтервалу T , а частина $(\tau_i - T)$, що залишилася, запам'ятовується. Якщо ж час вільного пробігу $\tau_i < T$, то розігрують процедуру розсіювання й знаходять нову траєкторію за час $T - \tau_i$. У момент часу T запам'ятовують усі параметри руху частинок, тобто фіксують розподіл $N(\vec{r}, \vec{k}, T)$. Значення часового кроку T має бути досить великим, щоб поле доводилося перераховувати як можна рідше, але разом з тим і досить малим, щоб не викликати значних чисельних похибок. Звичайно T обирають таким, щоб навіть в області сильного поля частинки пролітали не більше одного кроку просторової сітки.

Крім параметрів руху частинок на кожному часовому кроці фіксують кількість частинок, поглинених або інжекттованих кожним електродом, а також обчислюють нормальну до електрода складову напруженості електричного поля, що дозволяє визначити струми в колі електродів.

З апроксимації нового розподілу густини заряду, розв'язання рівняння Пуассона й розігрування методом Монте-Карло часу вільного пробігу починається наступний цикл аналізу руху частинок. Цикли обчислень повторюють до того моменту, поки цікавить розвиток процесу. Послідовність розподілів $N(\vec{r}, \vec{k}, nT)$, що утворюється, імітує еволюцію реальної функції розподілу на певному інтервалі часу. Одним з найважливіших фрагментів алгоритму моделювання є блок статистичної обробки результатів, які можуть усереднюватися як на кожному часовому кроці, так і за більш довгих інтервалів часу. Слід також пам'ятати про проблему сприйняття досить

великих масивів інформації, що утворюються у результаті моделювання, тому велику увагу варто приділити блоку візуалізації даних.

Для ілюстрації особливостей методу Монте-Карло і його можливостей наведемо деякі результати моделювання фізичних процесів в арсенід-галієвому польовому транзисторі із затвором у вигляді бар'єра Шотткі. Типове подання безпосередніх результатів моделювання траєкторій і поля зображено на рис. 1.5 на тлі структури транзистора у вигляді просторового розподілу потенціалу й розташування частинок у фіксований момент часу. Це можна зробити окремо для різних долин, що наочно показує перехід електронів у верхні долини лише в області сильного поля у стоковій частині підзатворної області.

Подібні розподіли можна зробити й для швидкості та енергії частинок (рис. 1.6) у вигляді як «індивідуальних», так і усереднених розподілів. Крім того, усереднювати можна як по всій товщині транзистора, так і в окремих шарах. Порівнюючи рисунки для швидкості й енергії корисно звернути увагу на розбіжність просторового розміщення максимумів цих кривих. Це пояснюється тим, що підвищення енергії супроводжується переходом електронів у верхні долини, де їх ефективна маса збільшується, а швидкість відповідно зменшується.

Найважливішою особливістю багаточастинкового методу Монте-Карло є можливість моделювання динамічних фізичних процесів. Приклади розподілів уздовж каналу транзистора усереднених значень напруженості електричного поля, енергії й швидкості у різні моменти часу в деякому перехідному режимі зображено на рис. 1.7. Ці розподіли разом із просторовими розподілами частинок, подібно до зображених на рис. 1.5 у ті ж часові моменти, можуть дати потрібну інформацію про досить тонкі динамічні особливості фізичних процесів у модельованій структурі.

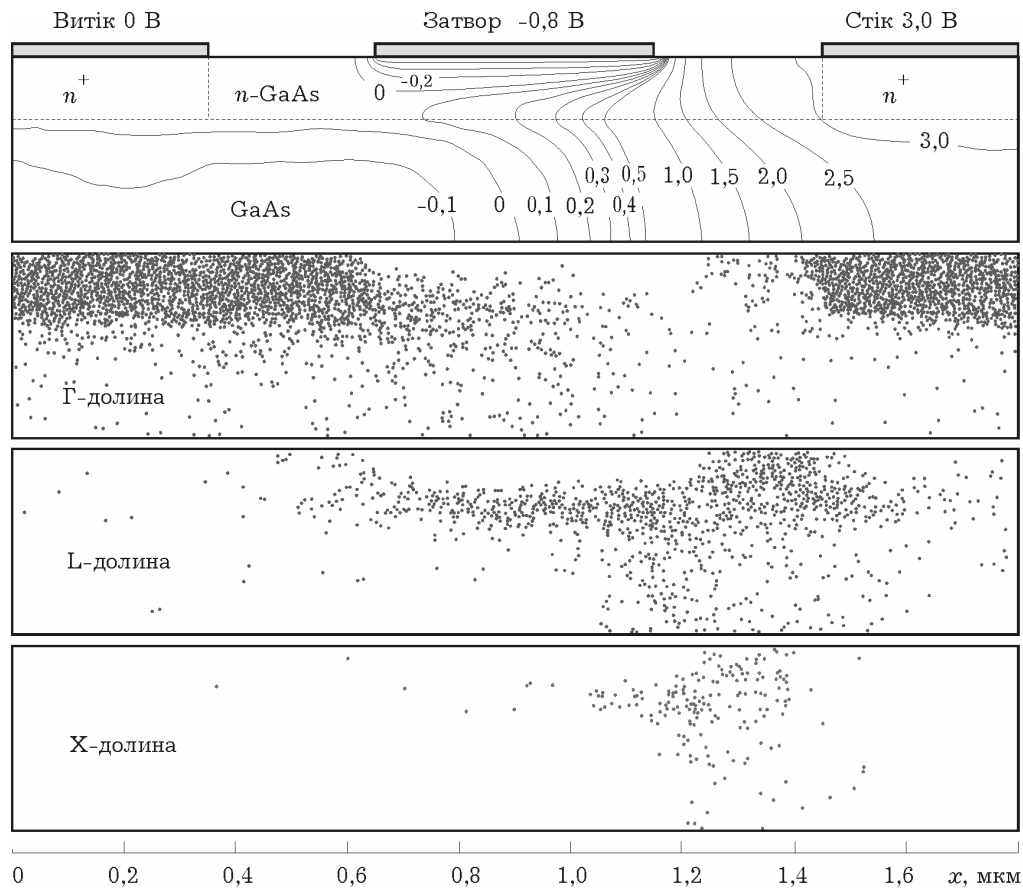


Рис. 1.5. Типове подання розподілу поля за допомогою еквіпотенціальних ліній і розподілу частинок у просторі модельованої структури (Просторовий розподіл частинок може бути наведено окремо для кожної долини; штриховою лінією позначено нижню межу епітаксiального шару з високим легуванням)

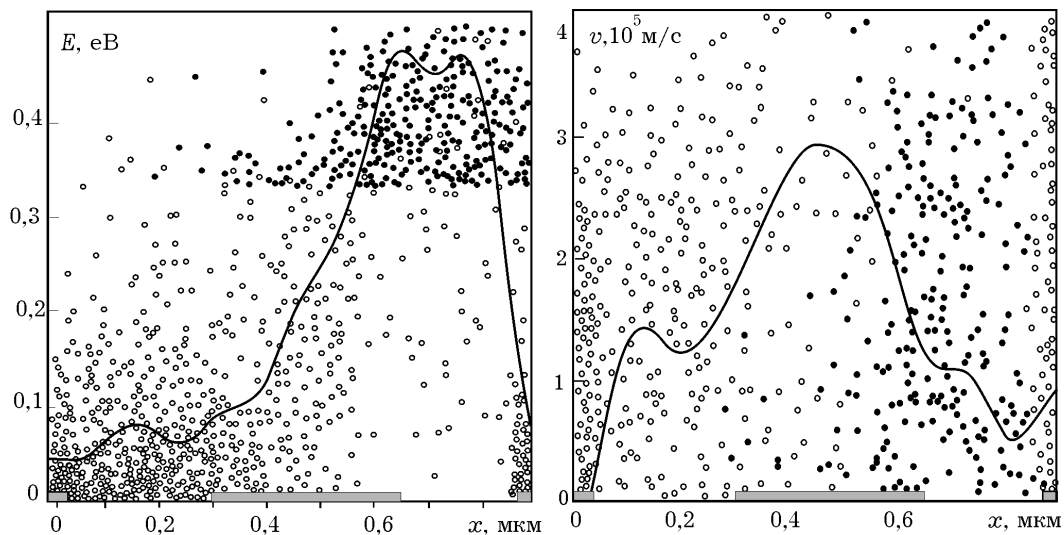


Рис. 1.6. Розподіл швидкості й енергії електронів уздовж каналу польового транзистора у формі «індивідуального» розміщення частинок й усереднених функцій (Світлі кружечки відповідають електронам нижньої долини, темні – верхніх долин)

Розраховуючи значення струмів електродів за заданих на них потенціалів у сталому режимі, можна отримати статичні вольт-амперні характеристики приладів. Якщо ж на електроди подавати східчасті імпульси, то за перехідними характеристиками, приклад яких подано на рис. 1.8, стандартними методами обчислюють частотні характеристики модельованої структури [6].

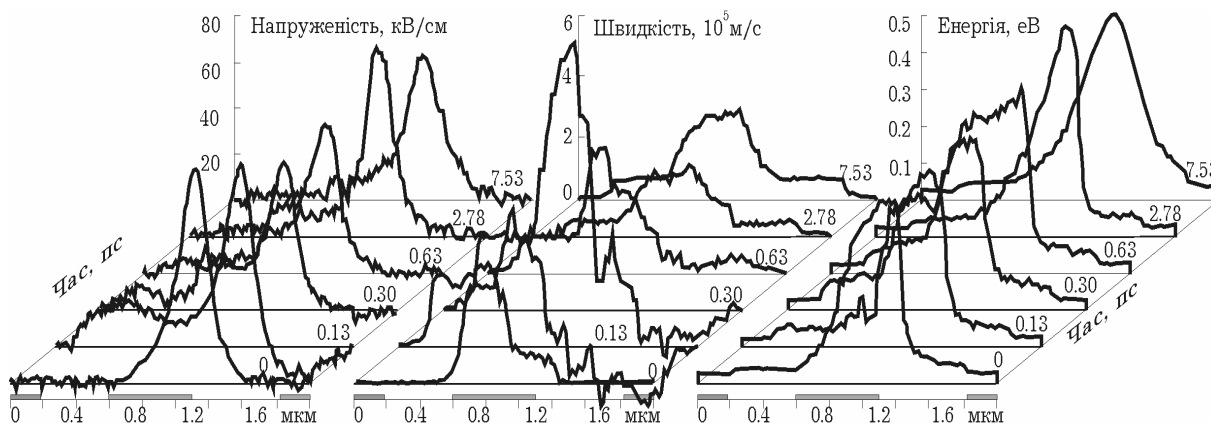


Рис. 1.7. Розподіли напруженості поля, середньої швидкості й енергії частинок уздовж каналу транзистора в різні моменти часу перехідного процесу

З рис. 1.6 та 1.7 видно одну з характерних рис методу Монте-Карло: крім регулярних процесів перенесення тут природно моделюються й шуми приладів. Ця безсумнівна перевага методу вимагає, однак, додаткових обчислювальних витрат, пов'язаних з визначенням середніх значень на тлі флуктуацій.

Особливо зручно застосовувати метод Монте-Карло до твердотільних структур, коли характерні розміри структур становлять мікрометри й менше. Для довших потрібно моделювати поведінку більшої кількості частинок протягом триваліших інтервалів часу, що вимагає додаткових ресурсів. Для коротших слід враховувати низку додаткових ефектів – кінцевий час зіткнень, квантові ефекти, інші види розсіювання тощо.

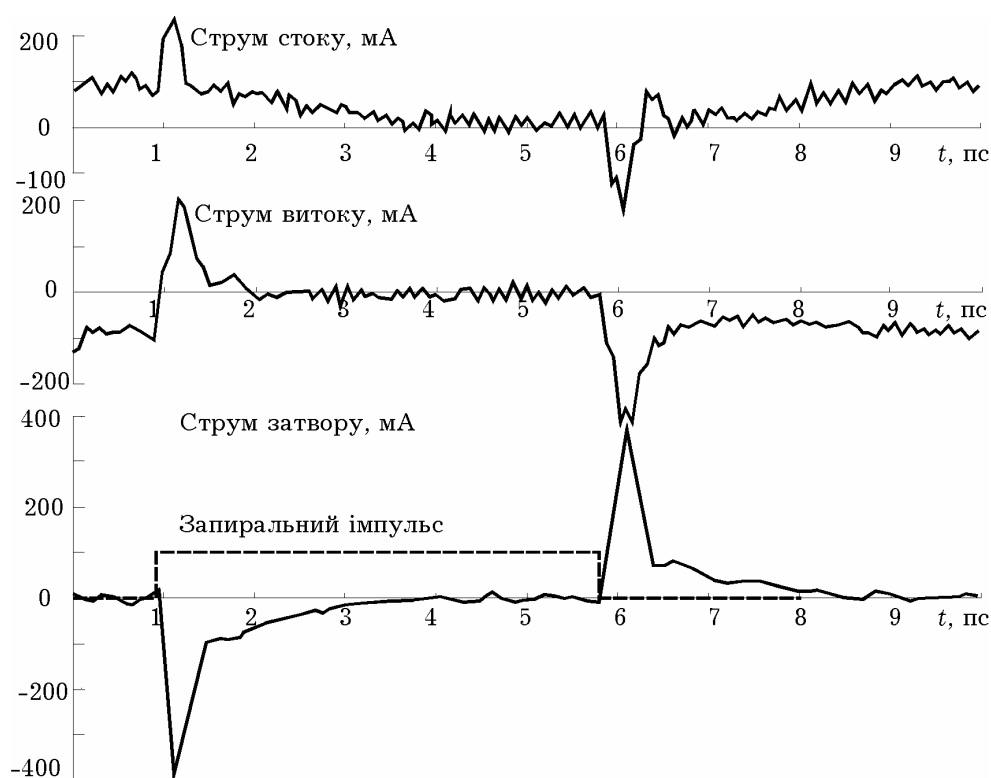


Рис. 1.8. Перехідні характеристики струмів стоку, витоку й затвора у разі подавання на затвор східчастого імпульсу: запирального й відкривального

1.3. РЕЛАКСАЦІЙНІ РІВНЯННЯ

1.3.1. Усереднення кінетичного рівняння

Наближення часу релаксації, істотно спрощуючи кінетичне рівняння, полегшує знаходження функції розподілу за відомих механізмів розсіювання й значень їх швидкості. Але отримувана при цьому інформація часто буває надлишковою, якщо потрібно знати лише деякі усереднені величини або їхні просторові розподіли. Найбільш важливими характеристиками колективу звичайно є концентрація, потік та енергія частинок. Більш просто й економно визначати ці величини або їх просторово-часові функції не через функцію розподілу, а безпосередньо з диференціальних рівнянь для цих величин. Такі рівняння можуть бути отримані з кінетичного рівняння, якщо провести усереднення до його розв'язку. Для цього всі доданки рівняння (1.12) домножуються на відповідну величину, що усереднюється, й інтегруються за бажаною областю k -простору.

У результаті отримуємо диференціальні рівняння в частинних похідних для середніх величин, що залежать лише від координат і часу. У літературних джерелах [5] такі рівняння описані в різних формах, що відрізняються використанням тих чи інших, часто досить тонких, припущень, пов'язаних переважно з вибором моделі (гідродинамічна, квазігідродинамічна та ін.) колективу частинок. Почасти із цієї причини такі рівняння називають *феноменологічними*, а за своєю суттю вони є рівняннями збереження.

Найпростіша форма таких рівнянь може бути отримана, якщо перед усередненням перші два доданки (1.12), що включають частинні похідні за координатами і часом, згорнути в «повну» похідну за цими змінними обернено до того, як це робилося на початку п. 1.1.1, з огляду на те, що після інтегрування за k -простором усі величини не будуть залежати від \vec{k} . Якщо усереднювана величина $\varphi(\vec{k})$ не залежить явно від \vec{r} і t , то її можна внести під знак частинних похідних за цими змінними, а інтеграл за обраним об'ємом k -простору від цих доданків, домножених на $\varphi(\vec{k})$, з урахуванням (1.6) набуде вигляду

$$\begin{aligned} \int_{V_k} \left(\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} \right) \varphi(\vec{k}) d\vec{k} &= \frac{d}{dt} \int_{V_k} N(\vec{r}, \vec{k}, t) \varphi(\vec{k}) d\vec{k} = \\ &= \frac{d}{dt} [n(\vec{r}, t) \varphi_{\text{cp}}(\vec{r}, t)]. \end{aligned} \quad (1.45)$$

Третій доданок у кінетичному рівнянні являє собою похідну dN/dt за фіксованих значень \vec{r} і t . Інтегруючи його за V_k і враховуючи, що $d\vec{k}/dt = \vec{F}/\hbar$ не залежить від k , отримаємо

$$\int_{V_k} \left(\frac{dN}{dt} \right) d\vec{k} = \int_{V_k} \left(\frac{d\vec{k}}{dt} \right) dN = \left(\frac{\vec{F}}{\hbar} \right) N|_{V_k}. \quad (1.46)$$

Якщо функція розподілу на краях області інтегрування прямує до нуля, що часто спостерігається при експоненціальному характері функцій, які до неї входять, то $N|_{V_k} = 0$.

Домножаючи перед інтегруванням третій доданок на \vec{k} і використовуючи інтегрування за частинами у формулі (1.3), можна отримати

$$\int_{V_k} \vec{k} \frac{dN}{dt} d\vec{k} = \frac{\vec{F}}{\hbar} \int_{V_k} \vec{k} dN = \frac{\vec{F}}{\hbar} \left[\vec{k} N|_{V_k} - \int_{V_k} N d\vec{k} \right] = -\frac{\vec{F}}{\hbar} n(\vec{r}, t). \quad (1.47)$$

Подібним чином перетворюється третій доданок, домножений на $E(\vec{k})$ з урахуванням того, що $dE/d\vec{k} = \hbar \vec{v}$:

$$\begin{aligned} \int_{V_k} E(\vec{k}) \frac{dN}{dt} d\vec{k} &= \frac{\vec{F}}{\hbar} \int_{V_k} E(\vec{k}) dN = \\ &= \frac{\vec{F}}{\hbar} \left[E(\vec{k}) N|_{V_k} - \int_{V_k} N \frac{dE}{d\vec{k}} d\vec{k} \right] = -\vec{F} n(\vec{r}, t) \vec{v}_{cp}(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (1.48)$$

Проведення подібних процедур інтегрування з правою частиною кінетичного рівняння дає швидкості зміни за рахунок зіткнень відповідно концентрації $-(dn/dt)_c$, сумарного значення хвильового вектора $-(d\vec{k}_\Sigma/dt)_c$ і повної енергії $-(dE_\Sigma/dt)_c$. У підсумку, підставляючи замість ϕ в інтеграл (1.45) 1, \vec{k} або E , отримаємо відповідні рівняння збереження для концентрації

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c, \quad (1.49)$$

середнього значення хвильового вектора

$$\frac{d(n\vec{k}_{cp})}{dt} - \frac{n\vec{F}}{\hbar} = \left(\frac{d\vec{k}_\Sigma}{dt} \right)_c \quad (1.50)$$

і середньої енергії

$$\frac{d(nE_{cp})}{dt} - n\vec{F}\vec{v}_{cp} = \left(\frac{dE_\Sigma}{dt} \right)_c. \quad (1.51)$$

Рівняння (1.50), враховуючи рівність $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, звичайно записують як рівняння збереження імпульсу:

$$\frac{d(n\vec{p}_{cp})}{dt} - n\vec{F} = \left(\frac{d\vec{p}_\Sigma}{dt} \right)_c. \quad (1.52)$$

1.3.2. Релаксаційні рівняння

Використовуючи для кінетичного рівняння наближення часу релаксації, праві частини рівнянь (1.49), (1.51) і (1.52) можна подати у формі

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_c = - \int_{V_k} \frac{(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{\Delta n}{\tau_n}; \quad (1.53)$$

$$\left(\frac{d\vec{p}_\Sigma}{dt}\right)_c = - \hbar \int_{V_k} \frac{\vec{k}(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{n\vec{p}_{cp}}{\tau_p}; \quad (1.54)$$

$$\left(\frac{dE_\Sigma}{dt}\right)_c = - \int_{V_k} \frac{E(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{n(E_{cp} - E_0)}{\tau_E}. \quad (1.55)$$

Подібно до того, як у правій частині кінетичного рівняння стоїть нерівноважний доданок до функції розподілу $\Delta N = N - N_0 = g(k)\Delta f$, так і в чисельнику правих частин стоять відхилення від рівноважних значень для концентрації $\Delta n = n - n_0$, середнього імпульсу ($\vec{p}_{cp0} = 0$) та середньої енергії ($E_0 = 3k_B T/2$). Величини у знаменнику називають відповідно часом релаксації концентрації (τ_n), імпульсу (τ_p) та енергії (τ_E).

Рівняння (1.52) у разі збереження загальної кількості частинок у зоні може бути записане у формі рівняння збереження для середнього дрейфового значення імпульсу $\vec{p}(\vec{r}, t)$ (індекс середнього значення опускаємо):

$$\frac{d\vec{p}}{dt} - \vec{F} = - \frac{\vec{p}}{\tau_p}, \quad (1.56)$$

або для дрейфової швидкості

$$\frac{d\vec{v}}{dt} - \frac{\vec{F}}{m^*} = - \frac{\vec{v}}{\tau_p}, \quad (1.57)$$

яке має простий фізичний зміст: швидкість напрямленого руху збільшується під дією сили електричного поля, як і для вільних частинок, і зменшується за рахунок розсіювання

носіїв, або «сили тертя» $-\vec{p}/\tau_p$. У статичному електричному полі ці сили врівноважуються і

$$\vec{v} = -\left(\frac{e\tau_p}{m^*}\right)\vec{\mathcal{E}} = -\mu\vec{\mathcal{E}}, \quad (1.58)$$

тобто рухливість визначається середнім часом релаксації імпульсу.

Відповідно до рівняння (1.54) цей час знаходять через усереднення оберненого часу релаксації $1/\tau = \lambda_\Sigma = \Sigma_i \lambda_i$, домноженого на хвильовий вектор, за функцією розподілу

$$\frac{\vec{p}}{\tau_p} = \frac{\hbar}{n} \int_{V_k} \vec{k} \lambda_\Sigma N(\vec{k}) d\vec{k}. \quad (1.59)$$

Наявність тут сумарної швидкості розсіювання, яка включає всі механізми, притаманні цьому матеріалу, означає, що всяке розсіювання, пружне чи непружне, з поглинанням фонона чи його збудженням, приводить тією чи іншою мірою до втрати напрямленого імпульсу і хаотизації руху.

Подібні міркування можуть стосуватися рівняння збереження енергії. За незмінної загальної кількості частинок у зоні рівняння (1.51) для середньої енергії у наближенні часу релаксації набуває вигляду (індекс середнього опускаємо)

$$\frac{dE}{dt} - \vec{F}\vec{v} = -\frac{(E - E_0)}{\tau_E}. \quad (1.60)$$

Для знаходження часу релаксації енергії τ_E використовується усереднення за функцією розподілу (1.55) швидкості розсіювання, домноженої на енергію,

$$\frac{E}{\tau_E} = \frac{1}{n} \int_{V_k} E(\vec{k}) \lambda_\Sigma N(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (1.61)$$

причому λ_Σ включає всі механізми розсіювання, крім пружних.

Відмінність між виразами (1.54), (1.55) з одного боку та (1.59), (1.61) з другого незначна за самою суттю наближення часу релаксації, коли відхилення від рівноважного стану незначне, а час релаксації τ є сталою величиною.

1.3.3. Міждолинна релаксація

У багатодолинних напівпровідниках електрони розміщуються у нижніх станах долин і утворюють відносно відособлені колективи зі своїми характерними параметрами, тому усереднення кінетичного рівняння можна проводити за об'ємами k -простору, що включають окремі долини. При цьому, якщо навіть загальна кількість електронів у зоні залишається постійною, то міждолинне розсіювання може приводити до перерозподілу електронів між окремими долинами і відповідно до зміни середніх значень імпульсу та енергії у цих долинах.

Розглянемо для спрощення дводолинну модель зони провідності (рис. 1.9). Знаходження рівнянь збереження для електронів i -долини передбачає інтегрування доданків кінетичного рівняння за вихідними k -станами тільки цієї долини. Кінцевими k' -станами, що входять до інтеграла зіткнень (1.16), можуть бути як внутрішні стани i -долини, так і стани іншої (інших) j -долини. Врахування тільки внутрішніх переходів з k - у k' -стани (внутрідолинних видів розсіювання) приведе до таких самих за формою рівнянь збереження, що й для однодолинної моделі. Для знаходження додаткових членів, зумовлених міждолинним

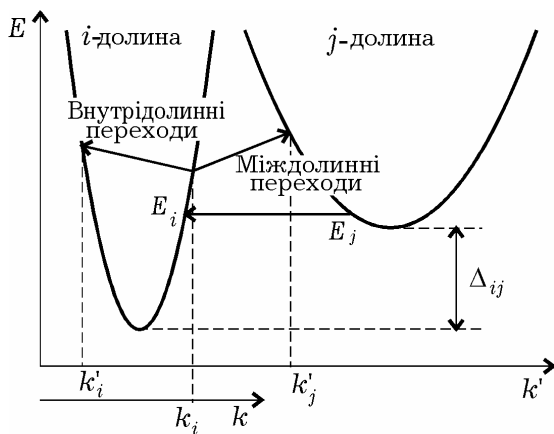


Рис. 1.9. Позначення внутрі-
і міждолинних переходів електронів
зі стану k у стан k' у дводолинній
моделі зонної структури

розсіюванням, в інтегралі зіткнень з усіх k' -станів треба залишити стани тільки j -долини.

У такому разі інтеграл зіткнень (1.16) під час процедури усереднення, що описана у п. 1.3.1 за $\phi = 1$, за k -простором набуває вигляду

$$\left[\frac{dn}{dt} \right]_{cij} = \quad (1.62)$$

$$= - \int_{V_k} \int_{V_{k'}} [w_{ij} N(k) - w_{ji} N(k')] dV_{k'} dV_k$$

Множники $(1 - f(k))$ та $(1 - f(k'))$ у виразі (1.16) фактично забороняють переходи у зайняті стани і для формального спрощення можуть бути включені у dV_k і $dV_{k'}$, якщо під кінцевими станами мати на увазі тільки вільні. Перший доданок, що характеризує вихід електронів з i -долини, з урахуванням рівняння (1.30) зручно подати у вигляді

$$-\int_{V_k} \left[\int_{V_{k'}} w_{ij} dV_{k'} \right] N(k) dV_k = -\int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} N(k) dV_k = \frac{-n_i}{\tau_{ij}}, \quad (1.63)$$

де τ_{nij} – час міждолинної релаксації *концентрації*, усереднений за функцією розподілу тільки i -долини:

$$\frac{1}{\tau_{ij}} = \frac{\int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} N(k) dV_k}{\int_{V_k} N(k) dV_k}. \quad (1.64)$$

Другий доданок, що характеризує перехід електронів до i -долини, подамо подібним чином, змінивши порядок інтегрування:

$$\int_{V_{k'}} \left[\int_{V_k} w_{ji} dV_k \right] N(k') dV_{k'} = -\int_{V_{k'}} \tau_{ji}^{-1} N(k') dV_{k'} = \frac{n_j}{\tau_{nji}}, \quad (1.65)$$

де τ_{nji} – концентраційний час міждолинної релаксації електронів з j -долини до i -долини, але усереднений за функцією розподілу j -долини:

$$\frac{1}{\tau_{nji}} = \frac{\int_{V_{k'}} \tau_{ji}^{-1} N(k') dV_{k'}}{\int_{V_{k'}} N(k') dV_{k'}}. \quad (1.66)$$

У підсумку отримаємо рівняння збереження для концентрації електронів у i -долині:

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{-n_i}{\tau_{nij}} + \frac{n_j}{\tau_{nji}} \quad (1.67)$$

й аналогічне рівняння для j -долини:

$$\frac{dn_j}{dt} = \frac{-n_j}{\tau_{nji}} + \frac{n_i}{\tau_{nij}}. \quad (1.68)$$

Ці рівняння являють собою систему рівнянь і природно, що праві частини у них відрізняються тільки знаком, адже загальна кількість частинок у зоні залишається незмінною:

$$\frac{d(n_i + n_j)}{dt} = 0. \quad (1.69)$$

Зазначимо також, що у стаціонарному стані ($dn_i/dt = dn_j/dt = 0$) міждолинні переходи взаємно зрівноважуються і з урахуванням рівноважної статистики [1]

$$\frac{\tau_{nij}}{\tau_{nji}} = \frac{n_i}{n_j} = \left(\frac{m_{di}^*}{m_{dj}} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-\Delta_{ij}}{k_B T_e} \right). \quad (1.70)$$

Подібні міркування можна провести також для рівняння збереження імпульсу (хвильового вектора). Домножуючи всі доданки кінетичного рівняння на \vec{k} та інтегруючи за частиною k -простору, що включає стани тільки i -долини, отримаємо рівняння збереження імпульсу у формі (1.50) або (1.52) з правою частиною (1.54), в якій τ_p враховує тільки внутрідолинні види розсіювання. Та частина інтеграла міждолинних зіткнень, що залишилась, має структуру, подібну до структури виразу (1.62), але підінтегральний вираз домножується на \vec{k} . Перший доданок, що характеризує зменшення імпульсу в i -долині за рахунок виходу з неї електронів, можна подати подібно до рівняння (1.63) у вигляді

$$-\int_{V_k} \left[\int_{V_{k'}} w_{ij} dV_{k'} \right] \vec{k} N(k) dV_k = -\int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} \vec{k} N(k) dV_k = -\frac{n_i \vec{k}_{icp}}{\tau_{pij}}, \quad (1.71)$$

де τ_{pij} – час міждолинної релаксації імпульсу, який визначається усередненням

$$\frac{1}{\tau_{pij}} = \frac{\int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} \vec{k} N(k) dV_k}{\int_{V_k} \vec{k} N(k) dV_k}. \quad (1.72)$$

Другий доданок, що характеризує перенесення імпульсу електронів з j -долини до i -долини, дорівнює нулю, адже після зіткнення ці електрони набувають випадкових значень хвильового

вектора, що симетрично розміщені відносно $k = 0$. У підсумку для рівняння балансу імпульсу в i -долині можна зберегти форму рівняння (1.52) з правою частиною виразу (1.54):

$$\frac{d(n_i \vec{p}_i)}{dt} - n_i \vec{F} = -\frac{n_i \vec{p}_i}{\tau_{pi}}, \quad (1.73)$$

але в τ_{pi} необхідно включити як внутрідолинні переходи, так і міждолинні:

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \frac{1}{\tau_{pii}} + \frac{1}{\tau_{pij}}. \quad (1.74)$$

Для j -долини рівняння збереження імпульсу аналогічне виразу (1.73) за відповідної заміни індексів:

$$\frac{d(n_j \vec{p}_j)}{dt} - n_j \vec{F} = -\frac{n_j \vec{p}_j}{\tau_{pj}}, \quad (1.75)$$

з часом релаксації імпульсу, що враховує як внутрі- так і міждолинні переходи з j -долини в i -долину:

$$\frac{1}{\tau_{pj}} = \frac{1}{\tau_{pjj}} + \frac{1}{\tau_{pji}}. \quad (1.76)$$

Рівняння (1.73) і (1.75) є системою рівнянь, яку до того ж треба розв'язувати спільно з системою (1.67) і (1.68), що характеризує заселеність долин.

Подібним чином можна провести перетворення інтеграла зіткнень, домноженого на E , й отримати рівняння збереження енергії для i -долини. За виглядом воно збігатиметься з рівнянням (1.51), що містить праву частину у формі (1.55) з часом релаксації енергії τ_{Eii} , який враховує тільки внутрідолинні механізми розсіювання. Міждолинне розсіювання приводить до появи у правій частині додаткових членів, один із яких $(-n_i E_i / \tau_{Eij})$ характеризує зменшення сумарної енергії електронів у i -долині за одиницю часу в разі їх переходу в j -долину і пов'язаний з міждолинним часом релаксації енергії τ_{Eij} , який визначається співвідношенням

$$\frac{1}{\tau_{Eij}} = \frac{\int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} E(k) N(k) dV_k}{\int_{V_k} E(k) N(k) dV_k}, \quad (1.77)$$

де обернений час релаксації τ_{ij}^{-1} знаходять інтегруванням імовірності переходів $w_{kk'}$ за k' -станами j -долин:

$$\tau_{ij}^{-1} = \int_{V_{k'}} w_{kk'} dk', \quad (1.78)$$

а усереднення у співвідношенні (1.77) проводять за k -станами i -долини.

У зворотних переходах електрони з j -долини в i -долину приносять енергію, яку зручно подати двома доданками у правій частині рівняння балансу енергії. Один із них, а саме $(n_j E_0 / \tau_{Eji})$, пропорційний концентрації n_j і рівноважні енергії E_0 , оскільки електрони потрапляють до i -долини безпосередньо у результаті релаксуючих зіткнень. Час релаксації τ_{Eji} визначається як і в співвідношенні (1.77), але усереднення проводиться для швидкості розсіювання $1/\tau_{ji}$ за станами j -долини.

Другий доданок $(n_j \Delta_{ji} / \tau_{nji})$ пов'язаний з міждолинною відстанню $\Delta_{ji} = E_j - E_i$, тобто з різним початком відліку кінетичної енергії у різних долинах. Швидкість зменшення цієї енергії визначається концентраційним часом релаксації τ_{nji} (1.66).

У результаті система рівнянь, що описують релаксацію енергії у дводолинній моделі, може бути подана у вигляді

$$\frac{d(n_i E_i)}{dt} - n_i \vec{v}_i \vec{F} = - \frac{n_i (E_i - E_0)}{\tau_{Ei}} - \frac{n_i E_0}{\tau_{Eij}} + \frac{n_j E_0}{\tau_{Eji}} + \frac{n_j \Delta_{ji}}{\tau_{nji}}; \quad (1.79)$$

$$\frac{d(n_j E_j)}{dt} - n_j \vec{v}_j \vec{F} = - \frac{n_j (E_j - E_0)}{\tau_{Ej}} - \frac{n_j E_0}{\tau_{Eji}} + \frac{n_i E_0}{\tau_{Eij}} - \frac{n_i \Delta_{ji}}{\tau_{nij}}, \quad (1.80)$$

де час релаксації τ_{Ei} і τ_{Ej} включає як внутрі-, так і міждолинні механізми розсіювання:

$$\frac{1}{\tau_{Ei}} = \frac{1}{\tau_{Eii}} + \frac{1}{\tau_{Eij}}; \quad \frac{1}{\tau_{Ej}} = \frac{1}{\tau_{Ejj}} + \frac{1}{\tau_{Eji}}. \quad (1.81)$$

Якщо скласти рівняння (1.79) та (1.80) і розділити їх на сумарну концентрацію $n = n_i + n_j$, а також ввести середні за долинами значення енергії $E = (n_i E_i + n_j E_j)/n$, швидкості дрейфу $\vec{v} = (n_i \vec{v}_i + n_j \vec{v}_j)/n$ і часу релаксації енергії $1/\tau_E = [n_i(E_i - E_0)/\tau_{Ei} + n_j(E_j - E_0)/\tau_{Ej}]/n$, то можна отримати рівняння збереження енергії електрона, середньої для двох долин:

$$\frac{dE}{dt} - \vec{v} \vec{F} = -\frac{E - E_0}{\tau_E} + \frac{\Delta_{ji}}{n} \left(\frac{n_j}{\tau_{nji}} - \frac{n_i}{\tau_{nij}} \right). \quad (1.82)$$

Рівняння (1.82) відрізняється від виразу (1.60) додатковим членом, який пов'язаний з релаксацією надлишкової енергії, що виникає у разі переходів електронів між нееквівалентними долинами з різним рівнем початку відліку кінетичної енергії. Під час переходу електрона з більш високої j -долини до i -долини його кінетична енергія збільшується на Δ_{ji} (рис. 1.9), що потребує додаткового часу для її релаксації. Зворотні ij -переходи зменшують енергію і відповідно прискорюють релаксаційні процеси.

Треба зважати, що цей доданок проявляється тільки при перерозподілі концентрацій по долинах. У стаціонарному стані ($dn_i/dt = dn_j/dt = 0$) відповідно до систем (1.67) та (1.68) доданки у дужках дорівнюють один одному, і ці ефекти взаємно зрівноважуються. Але в динамічних ситуаціях це явище може бути досить помітним, оскільки міждолинна відстань Δ_{ji} (наприклад, в арсеніді галію вона становить близько 0,3 еВ) звичайно на порядок перевищує рівноважне значення енергії.

Іноді загальний середній час релаксації енергії визначають як

$$\frac{1}{\tau_E} = \frac{n_i / \tau_{Ei} + n_j / \tau_{Ej}}{n}, \quad (1.83)$$

де ваговими коефіцієнтами є тільки концентрації, що цілком узгоджується з наближенням часу релаксації п. 1.1.3, де час τ може бути знайдений за рівноважною функцією розподілу (1.26).

1.4. РІВНЯННЯ ДРЕЙФОВО-ДИФУЗІЙНОЇ МОДЕЛІ

У практиці моделювання динамічних властивостей приладів широко використовують *гидродинамічну модель*, основану на поданні електронного колективу у вигляді «нестискуваної рідини», для якої можна припустити, що $\operatorname{div} \vec{v} = 0$.

Якщо область інтегрування V_k включає стани тільки однієї зони, наприклад зони провідності, а міжзонні генераційно-рекомбінаційні переходи взаємно зрівноважуються, то $(dn/dt)_c = 0$ і повне число частинок у зоні зберігається:

$$\frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{d\vec{r}}{dt} \frac{\partial n}{\partial \vec{r}} = \frac{\partial n}{\partial t} + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} n = 0. \quad (1.84)$$

Якщо врахувати тотожність $\operatorname{div}(n\vec{v}) \equiv \vec{v} \cdot \operatorname{grad} n + n \operatorname{div} \vec{v}$, можна отримати рівняння

$$\frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} + \operatorname{div}(n\vec{v}) = 0, \quad (1.85)$$

яке (домножене на заряд електрона) відоме як *рівняння неперервності* струму або *закон збереження заряду*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (1.86)$$

Однак, на відміну від фундаментального рівняння неперервності, сюди входить густина заряду і струму, що створюється тільки рухливими електронами зони провідності.

Якщо рівноважний стан порушено і швидкості генерації $G_n = (dn/dt)_c^+$ та рекомбінації $R_n = (dn/dt)_c^-$ різні, то рівняння неперервності для рухливих електронів за цих умов звичайно записують у вигляді

$$\frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} + \operatorname{div} \left(\frac{\vec{j}_p}{e} \right) = G_n - R_n. \quad (1.87)$$

Аналогічний вигляд має і рівняння для дірок:

$$\frac{dp(\vec{r}, t)}{dt} + \operatorname{div} \left(\frac{\vec{j}_p}{e} \right) = G_p - R_p. \quad (1.88)$$

У загальному випадку електронні й діркові струми визначаються дрейфовим і дифузійним механізмами:

$$\begin{aligned}\vec{j}_n &= en\mu_n\vec{\mathcal{E}} + eD_n \text{grad } n; \\ \vec{j}_p &= ep\mu_p\vec{\mathcal{E}} - eD_p \text{grad } p.\end{aligned}\tag{1.89}$$

Рівняння (1.87) і (1.88), які включають вирази (1.89), називають *рівняннями неперервності для рухливих носіїв*. Разом із рівнянням Пуассона

$$\nabla^2 V = \frac{-\rho(\vec{r})}{\epsilon\epsilon_0} = \frac{e(\Delta n - \Delta p)}{\epsilon\epsilon_0}\tag{1.90}$$

та описом механізмів генерації і рекомбінації вони являють собою систему рівнянь для аналізу поведінки нерівноважних носіїв у напівпровідниковій плазмі. Якщо швидкості генерації і рекомбінації подати у вигляді рівняння (1.53), то час релаксації τ_n і τ_p називають *часом життя* нерівноважних носіїв.

Система рівнянь дрейфово-дифузійної моделі дозволяє розраховувати розподіли концентрації носіїв і електричного поля, а за ними значення швидкості носіїв, розподіл густини струму і відповідно значення струму електродів приладу. Для сильних електричних полів така модель має обмежені можливості. У деяких випадках можна використовувати в тому або іншому вигляді апроксимації залежностей рухливості й коефіцієнта дифузії від напруженості електричного поля. Але за своєю суттю ця система є «локальною» моделлю струмоперенесення, в якій швидкість носіїв визначається локальним значенням напруженості поля. Вона не може описувати ефектів сплеску дрейфової швидкості, ефектів накопичення носіїв через зміну їх енергії та ефективної маси в разі переходу у верхні долини.

Моделі традиційних електронних компонентів належать переважно до класу дрейфово-дифузійних; використовуючи їх, можна досить точно розраховувати характеристики пристроїв традиційної мікроелектроніки. Однак під час виведення цих моделей враховувалося, що характерні розміри компонентів перевищують довжину вільного пробігу в сотні та більше разів.

Якщо ж ця умова не виконується, то самі поняття дрейфу та дифузії втрачають сенс, використання моделей стає необґрунтованим, а їх результати перестають узгоджуватися з експериментальними даними.

Усі поняття, що використовуються у дрейфово-дифузійних моделях, мають інтуїтивно зрозуміле фізичне значення, адже в межах вказаних моделей усі хвильові властивості електрона враховано ефективно: взаємодію з періодичним полем кристала враховано в ефективній масі та зонній структурі; наявність напівцілого спіну та принцип тотожності електронів – у використанні квантової статистики замість класичної тощо. Це значно спрощує розуміння та побудову моделей, адже набагато простіше уявляти електрон як частинку, аніж як об'єкт, котрому притаманні як хвильові, так і корпускулярні властивості.

Отже, у мікроелектроніці для вирішення практичних завдань переважно вдається уникнути необхідності використання апарату двох найскладніших розділів сучасної фізики твердого тіла: квантової теорії та теорії розсіювання. І це незважаючи на те, що хвильові властивості електрона, як і процеси взаємодії з різноманітними дефектами ґратки (розсіювання), зрештою є визначальними з погляду застосування конкретних матеріалів у тих чи інших цілях.

1.5. КВАНТОВІ МОДЕЛІ ПЕРЕНЕСЕННЯ ЗАРЯДУ

1.5.1. Загальні положення

Метод кінетичного рівняння, строго кажучи, є справедливим лише для систем, що складаються з класичних частинок. Як відомо, у традиційній твердотільній електроніці для опису процесів перенесення заряду зазвичай використовують одноелектронне наближення та метод ефективної маси. За допомогою останнього в лівій частині рівняння (1.13) квантова природа електронів ураховується через відповідну модифікацію

функції розподілу. В цілому ж рух електронів вважається класичним. Інтеграл зіткнень у правій частині вказаного рівняння враховує квантову природу електронів [8]. Таким чином, у разі застосування методу кінетичного рівняння вважається, що електрони між зіткненнями рухаються як класичні частинки, а розсіюються як квантові частинки. Із цих причин використане кінетичне рівняння вважають «напівкласичним», оскільки воно все ж частково враховує квантову природу електронного колективу.

Кінетичне рівняння Больцмана є достатнім та дуже потужним засобом моделювання нерівноважних електронних процесів у типових компонентах твердотільної електроніки. Однак постає питання, які квантові ефекти можна «загубити», вважаючи рух електронів «класичним» у проміжках між зіткненнями. Один з таких ефектів – тунельний ефект, що полягає в скінченній імовірності проходження потенціального бар'єра. З нього також випливає можливість знайти електрон у «забороненій зоні», якщо використовувати терміни зонної теорії. Такі ефекти можуть суттєво впливати на параметри конкретного електронного компонента, якщо його характерні розміри менші за певні типові довжини, притаманні електронному колективу:

1. Довжина хвилі де Бройля електрона λ_F , що пов'язана з його хвильовим вектором k співвідношенням $\lambda_F = 2\pi/k$. За низької температури більшість електронів, що беруть участь у процесах перенесення, перебуває поблизу рівня Фермі, тому хвильовий вектор k вибирають рівним хвильовому вектору Фермі: $k = k_F$. Умовно вважають, що значення довжини хвилі де Бройля в типових напівпровідникових структурах $\lambda_F = 35$ нм [9]. У конкретному випадку λ_F може відрізнятися від цього значення.

2. Середня довжина релаксації імпульсу L_p визначається через час релаксації імпульсу: $L_p = \tau_p v_F$, де v_F – швидкість

Фермі, яку знаходять за формулою $v_{\text{ф}} = \hbar k_{\text{ф}} / m$, де $k_{\text{ф}}$ – хвильовий вектор Фермі. За типової довжини хвилі Фермі $\lambda_{\text{ф}} = 35$ нм приблизна швидкість Фермі $v_{\text{ф}} = 3 \cdot 10^5$ м/с. Вважаючи, що час релаксації імпульсу $\tau_p = 0,1$ пс, типове значення довжини релаксації імпульсу L_p становить близько 0,3 мкм.

3. Довжина релаксації фази $L_{\text{ф}}$ визначається як середній шлях, який має пройти електрон для того, щоб позбутися «фазової пам'яті». Останнє поняття буквально означає збереження детермінованого зв'язку між фазою хвильової функції електрона в різні моменти часу та в різних точках простору. Роль величини $L_{\text{ф}}$ полягає в тому, що для спостереження інтерференційних ефектів вона повинна мати значення більше за розміри системи. Поняття фазової релаксації, хаотизації фази та фазової когерентності не пов'язані безпосередньо з актами пружних чи непружних зіткнень, які не обов'язково призводять до хаотизації фази. І навпаки, рандомізація фази може не супроводжуватися зміною імпульсу чи енергії. Іноді, однак, акт розсіювання супроводжується хаотизацією фази. Прикладом може бути електрон-електронне розсіювання. Однак у більшості випадків хаотизація фази не впливає на величину довжини вільного пробігу, оскільки акти хаотизації здебільшого пружні. Для розуміння загальної причини хаотизації фази можна користуватися загальним правилом: флуктуаційні центри розсіювання зумовлюють фазову релаксацію, а стаціонарні центри розсіювання – ні.

Згадані довжини використовують для визначення поняття макроскопічної, мікроскопічної та мезоскопічної систем.

*Мікроскопічна система*¹⁵ – це система, геометричні розміри якої менші за принаймні один із параметрів $\lambda_{\text{ф}}$, L_p , $L_{\text{ф}}$. Якщо ж значення усіх трьох параметрів значно менші за геометричні розміри системи, така система є *макроскопічною*.

¹⁵ Поняття «мікроскопічність» тут не прив'язується до геометричних розмірів відповідних систем (хоча їх типові розміри становлять менше кількох десятків нанометрів і зазвичай їх називають «наноскопічними»), а лише вказує на наявність у таких системах квантових ефектів, що не можуть бути враховані в межах напівкласичного підходу.

Саме до таких систем може бути застосований метод кінетичного рівняння. Системи, які не можуть бути віднесеними ні до мікроскопічних, ні до макроскопічних, називають *мезоскопічними* (від гр. «*mesys*» – середній, проміжний). Отже, мезоскопічні системи – це системи, геометричні розміри яких менші за найбільший з параметрів λ_F , L_p , L_F та більші за найменший із них. Слід додати, що мезо- та мікроскопічні системи вважають такими, якщо відповідні умови виконуються принаймні для одного просторового напрямку. Так, багатошарові напівпровідникові гетероструктури (надгратки, РТД, транзистори з високою рухливістю електронів (*HEMT*)) належать до мезоскопічних систем.

Зрозуміло, що чіткої межі між трьома введеними типами систем не існує. Частіше за все електронні структури, що мають розміри від кількох десятків нанометрів до одиниць мікрометрів, класифікуються як мезоскопічні, іноді їх називають *субмікронними*. Конкретні цифри визначаються інтенсивністю процесів розсіювання та хаотизації, а також параметрами електронного колективу в кожному конкретному випадку.

Для мікроскопічних систем метод кінетичного рівняння здебільшого не може бути застосований принципово. Застосовний до мезоскопічних систем метод кінетичного рівняння Больцмана дає похибку, що зростає зі зменшенням розмірів системи. З означених причин виникає необхідність використання іншого формалізму для опису мікроскопічних та мезоскопічних систем. Нині використовують такі методи, що частково чи повністю виконують функцію методу кінетичного рівняння [10–12]:

- метод нерівноважних функцій Гріна;
- метод функціонала густини;
- метод функції розподілу Вігнера.

Широкого використання набули феноменологічні моделі електронних процесів, такі як метод хвильових функцій, метод тунельного гамільтоніана та інші специфічні методи, що розробляються для моделювання конкретного приладу. Почасті

вони найбільш ефективні, однак їх застосовність обмежується вузьким колом структур.

Якісні уявлення про процеси у структурах, в яких довжина фазової когерентності L_ϕ перевищує геометричні розміри, розробив 1957 р. Ландауер [13], який розвинув їх разом з Буттікером – так з’явився феноменологічний формалізм Ландауера–Буттікера, що є системою суто утилітарних уявлень про явища у мікроскопічних системах, котрі входять до складу макроскопічної системи. У 1992 р. формула Ландауера була строго виведена з уявлень кінетики з урахуванням міжелектронної взаємодії [14]. Історична роль Ландауера полягала в тому, що він першим запропонував розглядати задачу про знаходження струму через малі об’єкти у вигляді задачі на проходження та відбивання електронних хвиль (англ. «*scattering problem*» – задача на «розсіювання») на відміну від, скажімо, формалізму Кубо, де задача про знаходження струму розглядалася як задача знаходження лінійного відклику на прикладену напругу.

Незважаючи на поважний вік формалізму Ландауера–Буттікера, він став основою для феноменологічних моделей РТД (створені Тсу та Есакі 1973 р.), одноелектронних транзисторів (створені Ліхарьовим 1987 р.), вуглецевих нанотрубок (створені Іджімою 1991 р.) та деяких інших перспективних електронних компонентів, зокрема пристроїв молекулярної електроніки [15].

Формалізм Ландауера–Буттікера є інтуїтивно зрозумілим якісним уявленням про електронні процеси в надмалих системах, однак через модифікацію та узагальнення можна отримати навіть ефективні кількісні моделі. Хорошими прикладами можуть бути «комбінована» модель РТД [16; 17; 18], «ортодоксальна» теорія одноелектронного тунелювання [19] та ін., які однозначно більш ефективні, а інколи можуть бути більш точними, ніж *ab initio*¹⁶ моделі.

¹⁶ *ab initio* (лат. «від початку») – розв’язання задачі з перших основоположних принципів без залучення емпіричних припущень.

Зауважимо, що метод побудови теорії Ландауера–Буттікера не був типовим для вітчизняної науки загалом і фізики зокрема, яка тяжіла до отримання уявлення про явища в конкретній системі шляхом обґрунтованих спрощень загальної теорії. Конкретні теорії зазвичай будувалися так, що мали стійкий логічний зв'язок із загальною теорією. На відміну від цих підходів західна школа часто розглядає конкретне явище для системи, яка зведена до максимально спрощеного вигляду (ліміти нульової температури, відсутність розсіювання, нескінченні довжини релаксації, відсутність електрон-електронних взаємодій), який усе ще допускає існування ефектів чи явищ, закономірності яких потрібно вивчити.

Класичним прикладом структур низької розмірності є напівпровідникові гетероструктури. Якщо в гетероструктурі характерний розмір лише в одному просторовому вимірі співмірний з λ_F , L_p , або L_F , то це означає, що така структура містить тонкі плівки різних напівпровідників товщиною до кількох нанометрів. Якщо через особливості конструкції напруга прикладається перпендикулярно до площин поділу нанорозмірних шарів, то говорять, що в таких конструкціях реалізується *поперечний транспорт*, а самі структури називають структурами з поперечним (іноді вертикальним) електронним транспортом. Прикладом таких структур є РТД, надґратки, різноманітні пристрої функціональної електроніки на їх основі.

Проблема, яка постає перед наноелектронікою у разі моделювання структур з поперечним транспортом, типова для наноелектроніки в цілому. Уявлення про електронний транспорт у «старих» пристроях не можуть відображати реальних процесів, що відбуваються в «нових» пристроях. Тому наноелектроніка не може формуватися як «надбудова» мікроелектроніки, і з цього погляду є революційним, а не еволюційним етапом розвитку електроніки.

Формувати засади теоретичної наноелектроніки доводиться на тому самому фундаменті, на якому була побудована

мікроелектроніка: багаточастинкова квантова теорія (в широкому розумінні цього поняття), що включає спецрозділи – статистичну фізику для опису рівноважних систем, квантову кінетику для опису нерівноважних систем, теорію розсіювання та деякі інші розділи теоретичної фізики.

Однак нині більшість моделей наноструктур є феноменологічними та не виводяться строго з положень теоретичної фізики. Вони не строгі навіть у тій мірі, в якій строгі напівемпіричні моделі пристроїв традиційної електроніки. Їх виникнення пояснюється відставанням теоретичної наноелектроніки від експериментальної. У той час як експериментальні зразки вже виготовлені й функціонують, виявляючи потрібні властивості, адекватних *ab initio* моделей майже немає; почасти проблемою є навіть якісне моделювання.

1.5.2. Метод хвильових функцій

Узагальнення методу ефективної маси. Рух електронів у гетероструктурах можна описати багаточастинковим рівнянням Шредінгера, яке рядом апроксимацій зводиться до системи *незалежних* між собою рівнянь для кожного з електронів [20]:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (1.91)$$

де ψ – одноелектронна хвильова функція; E – енергія електрона; \hat{H} – оператор Гамільтона в одноелектронному наближенні,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}), \quad (1.92)$$

в якому m – маса спокою електрона; \hbar – стала Планка; $V(\mathbf{r})$ – потенціальна енергія електрона в полі всіх інших електронів та іонів, що не змінюється зі зміщенням на вектор трансляції \mathbf{a} : $V(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = V(\mathbf{r})$; $U(\mathbf{r})$ – неперіодична частина потенціальної енергії електрона, зумовлена зовнішніми полями, зокрема розривами екстремумів зон у гетероструктурах, прикладеною напругою та об'ємним зарядом.

Для розв'язання рівняння Шредінгера в *масивному* напівпровіднику існує простий метод, який дозволяє уникнути розгляду члена $V(\mathbf{r})$ – це *метод ефективної маси*. Він ґрунтується на тому, що поблизу екстремумів зон у рівнянні (1.91) гамільтоніан (1.92) можна замінити гамільтоніаном

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}). \quad (1.93)$$

Функції, що є розв'язком рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1.93), коректно називати *обвідними хвильової функції*, а не просто «хвильовими функціями». Така назва зумовлена тим, що за $U(\mathbf{r}) = \text{const}$ розв'язком (1.91) є функції Блоха: $\psi(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, де функція $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ повторює періодичність ґратки та суттєво змінюється протягом періоду ґратки. Множник $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ поблизу екстремумів зон змінюється на періоді ґратки повільно, тому він фактично є обвідною всієї хвильової функції. Якщо $U(\mathbf{r})$ повільно змінюється на періоді ґратки, то можна показати, що це майже не вплине на $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$; натомість зміна відобразиться на другому члені [21]. У множник $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ можна ввести залежність хвильового вектора від координати $\mathbf{k}(\mathbf{r})$ або ж замінити $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ на $\chi(\mathbf{r})$, що повільно змінюється: $\psi(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r})\mathbf{r}} = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r})$. Функція $\chi(\mathbf{r})$ фактично і є шуканою в рівнянні (1.91) з гамільтоніаном (1.93); природно, що її теж називають обвідною. Далі, однак, будемо позначати обвідну хвильової функції через $\psi(\mathbf{r})$, якщо не буде вказано іншого.

Метод ефективної маси використовують у традиційній електроніці, зокрема для розрахунку локалізованих станів електрона в кристалі [6]. Його з деякими модифікаціями застосовують і для розв'язання рівняння Шредінгера в гетероструктурах.

Якщо вважати, що $U(\mathbf{r})$ можна подати у вигляді

$$U(\mathbf{r}) = U_x(x) + U_y(y) + U_z(z),$$

то рівняння (1.93) розпадеться на три незалежні рівняння:

$$\hat{H}_x \psi_x = E_x \psi_x; \quad (1.94)$$

$$\hat{H}_y \psi_y = E_y \psi_y; \quad (1.95)$$

$$\hat{H}_z \psi_z = E_z \psi_z, \quad (1.96)$$

а його розв'язок можна буде шукати у вигляді $\psi = \psi_x \psi_y \psi_z$; $E = E_x + E_y + E_z$ [22]. Тут $\hat{H}_z = -(\hbar^2 / 2m^*)(d^2 / dz^2) + U(z)$, аналогічно визначаються \hat{H}_x та \hat{H}_y .

Розглянемо структуру з поперечним транспортом, що містить гетеромежі, задані рівняннями $z = \text{const}$. Згідно з поданим визначенням структури з поперечним транспортом складові $U_x(x)$ та $U_y(y)$ можна відповідним вибором початку відліку потенціальної енергії прирівняти до нуля. Тому рівняння (1.94) та (1.95) будуть мати тривіальні розв'язки у вигляді плоских хвиль:

$$\psi_{\parallel} \sim \psi_x \psi_y e^{i(k_x x + k_y y)} \equiv e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{r})}.$$

Натомість у напрямку $0z$ слід розв'язувати рівняння Шредінгера (1.96), яке у розкритому вигляді можна записати як

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} + U(z) = E_z \psi_z. \quad (1.97)$$

Надалі розглядатимемо лише складову обвідної ψ_z , яку позначатимемо, опускаючи індекс, через ψ .

Розрахунок електронного струму. З рівняння Шредінгера можна отримати закон збереження густини потоку ймовірності, який визначається за формулою $\mathbf{J} = (i\hbar / 2m)(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$ [8]. Помноживши її на заряд електрона, отримаємо густину створюваного рухом електрона електричного струму, для якого також автоматично виконується рівняння неперервності.

Граничні умови. Розглянемо процеси, що відбуваються поблизу межі двох матеріалів А та Б у площині $z = a$. Відомо, що потенціальна енергія електрона зони провідності зазнає стрімкої зміни на гетеромежі, у першому наближенні – стрибкоподібної. Різні приклади гетеромеж зображено на рис. 1.10.

Крім того, стрибкоподібної зміни зазнає також ефективна маса, яка у матеріалах А та Б в загальному випадку різна.

Розглянемо електрон у зоні провідності поблизу гетеро-межі GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As у площині $z = a$. На межі цієї гетеро-парі відбувається рух електронів провідності в станах Г-долини, яка є найнижчою для обох сполук. Саме такий випадок покладемо в основу наступного розгляду.

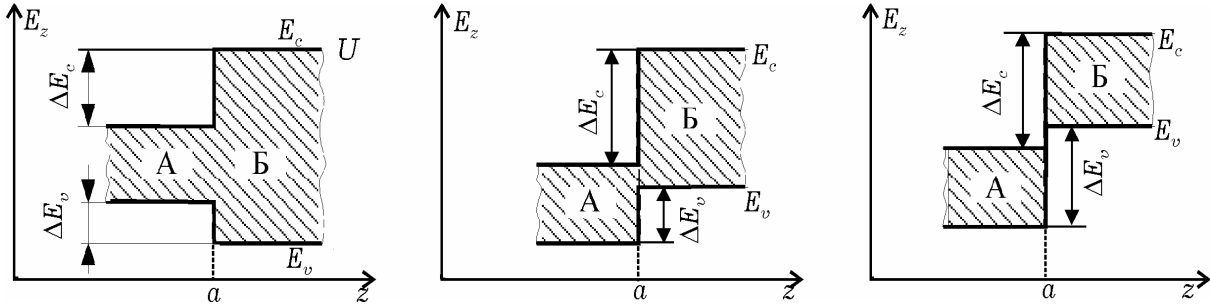


Рис. 1.10. Типи розривів меж забороненої зони (заштрихована)

для гетеропереходів: a – перехід I типу (А-Б = GaAs-AlGaAs;

GaSb-AlSb; GaAs-GaP; InGaAs-InAlAs; InGaAs-InP);

\bar{a} – перехід II типу (А-Б = InP-Al_{0.48}In_{0.52}As; InP-InSb; BeTe-ZnSe;

GaInP-GaAsP; Si-SiGe); e – перехід III типу (А-Б = InAs-GaSb)

Запишемо рівняння Шредінгера для обвідної хвильової функції в околі площини $z = a$ ліворуч та праворуч:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U_A = E_z \psi \quad (z = a^+); \quad (1.98)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_B^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U_B = E_z \psi \quad (z = a^-), \quad (1.99)$$

де індексами «А» та «Б» позначені відповідні величини в сполуках «А» та «Б».

Позначимо розв'язки рівнянь (1.98) та (1.99) через ψ_A та ψ_B відповідно. Вважається, що на гетеромежі періодична складова хвильової функції $u_{nk}(\mathbf{r})$ та її похідна неперервні [23]. З вимоги до неперервності хвильової функції випливає неперервність її обвідної, тож мусимо покласти

$$\psi_A(a) = \psi_B(a). \quad (1.100)$$

Запишемо вирази для z -проекцій потоків густини ймовірності в обвідній хвильовій функції у площинах $z = a^+$ та $z = a^-$, J_A та J_B відповідно:

$$J_A = \frac{i\hbar}{2m_A} \left(\psi_A^* \frac{d\psi_A}{dz} - \psi_A \frac{d\psi_A^*}{dz} \right); \quad (1.101)$$

$$J_B = \frac{i\hbar}{2m_B} \left(\psi_B^* \frac{d\psi_B}{dz} - \psi_B \frac{d\psi_B^*}{dz} \right). \quad (1.102)$$

Виконання фундаментального закону збереження густини потоку ймовірності в квантовій механіці впливає зі звичайного рівняння Шредінгера. Цей закон автоматично виконується для рівняння Шредінгера зі звичайною, сталою масою електрона. Але у площині точки $z = a$, відповідно до прийнятої моделі, ефективна маса зазнає стрибкоподібної зміни. Тому для виконання закону збереження необхідно примусово накласти умову:

$$J_A = J_B, \quad (1.103)$$

з чого випливає, що

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{d\psi_A}{dz} = \frac{1}{m_B^*} \frac{d\psi_B}{dz}. \quad (1.104)$$

Рівняння (1.100) та (1.104) являють собою загальні вимоги до обвідної хвильової функції та її похідної на гетеромежі та є хорошими наближеннями для більшості гетеромеж. Їх можна записати в неявному, однак компактному вигляді, внівши під першу похідну в рівняння (1.97) ефективну масу:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi_z}{dz} + U(z) = E_z \psi_z. \quad (1.105)$$

Рівняння (1.105) широко застосовують для моделювання електронного транспорту в гетероструктурах; його також застосовують, коли ефективна маса змінюється плавно. Останнього ефекту можна досягти, наприклад, змінюючи молярну частку x в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ від нуля до 33 % упродовж кількох нанометрів. Такі структури називаються «варизонними». Їх дозволяють виготовляти такі сучасні технології:

– молекулярно-променева епітаксія (англ. абревіатура – *MBE*);

– хімічне випаровування металоорганічних сполук з газової фази (MOCVD).

Рівняння (1.105) часто називають *рівнянням Шредінгера з ефективною масою*, воно є ключовим компонентом «методу обвідної хвильової функції», що застосовується для моделювання гетероструктур. Назва цього методу є синонімом *методу ефективної маси*. У вітчизняній літературі часто опускають слово «обвідна» та говорять просто «метод хвильових функцій».

1.6. МОДЕЛЮВАННЯ СУБМІКРОННИХ СТРУКТУР

1.6.1. Задачі моделювання і типи моделей

Задачі, що розв'язуються в інженерній практиці за допомогою моделей, залежать, насамперед, від кола користувачів. Зручно, хоч до певної міри й умовно, виділити три їх основні типи. До перших належать розробники НВЧ-пристроїв, що використовують модель як завершений програмний продукт, який часто вбудовується у САПР, не вимагає зміни або підстроювання яких-небудь внутрішніх параметрів моделі й тому гранично формалізований і добре тестований в заданих межах зміни початкових фізико-топологічних і електричних параметрів. За внутрішньою структурою це можуть бути моделі, основані на простих аналітичних співвідношеннях, отриманих з початкових фізичних рівнянь, або на апроксимації модельованих параметрів чисельними або аналітичними методами. Основна вимога до таких моделей – швидкий і адекватний (за заданої точності) розрахунок тієї або іншої системи параметрів, характерних для певного приладу. Особливою вимогою є мінімальний набір вхідних даних, оскільки розробники пристроїв часто ведуть проектування в умовах недостатньої інформації про параметри використовуваних приладів.

Іншого роду задачі можуть розв'язуватися за допомогою моделювання розробниками приладів. До типових конструк-

торських завдань належать аналіз зв'язків між початковими топологічними, фізичними й електричними даними і вихідними параметрами приладів. Зазвичай цей аналіз цікавий не сам по собі, його використовують для виявлення оптимальних (за обраними критеріями) або допустимих початкових параметрів приладів. Для цього модель зазвичай використовують багато разів із цілеспрямованим перебиранням вхідних даних, яке виконується або вручну, або здійснюється за допомогою стандартних чи спеціалізованих процедур оптимізації. Необхідним атрибутом цього процесу є аналіз чутливості результату (цільової функції) до варіантів тих чи інших вхідних даних або параметрів. Це дозволяє виявляти найбільш чутливі зв'язки і проводити пошук більш цілеспрямовано.

Як приклади задач, які постають перед розробниками, приміром ПТШ й гетеротранзисторів, можна навести:

- обрання профілів легування, зокрема допустимих концентрацій і виду домішок у підкладці й буферному шарі;
- дослідження впливу опорів омичних контактів на параметри приладів;
- пошук оптимального опору металізації затвора та його розмірів;
- оцінювання впливу паразитних елементів конструкції приладу на його параметри;
- пошук і прогнозування оптимальних режимів роботи з погляду підсилювальних і шумових властивостей;
- аналіз статистичних і регулярних неоднорідностей топології приладу;
- роль паразитних домішок у матеріалі (повільних пасток, поверхневих станів) тощо.

Цей перелік, який постійно поповнюється, у принципі не може бути повним. Вирішення технологічних задач і задач конструювання приладів вимагають глибокого розуміння фізичних процесів, що відбуваються в окремих областях приладу, вміння отримати й обробити результати моделювання, грамотно

їх інтерпретувати. Широкий спектр завдань, вирішуваних при цьому конструкторами і технологами, стимулює розробку великого спектра моделей різного рівня, що відображають ті або інші процеси в приладах, оскільки, звичайно, створити «повні» моделі, які б «усе враховували», неможливо. Для перевірки результатів моделювання, що викликають сумніви, або для отримання інформації про немодельовані процеси, корисне створення тестових структур.

До третьої групи користувачів моделей слід віднести їх розробників. Окрім отримання нових знань, їх робота полягає в тому, що процесу створення моделі, тобто вибору придатних припущень та формуванню алгоритму, має передувати аналіз різноманітних фізичних чинників для виділення головних та ігнорування другорядних. На цьому етапі їх робота має проходити у тісній взаємодії з розробниками приладів, оскільки процес моделювання повинен «підживлюватися» експериментальними даними, отриманими під час випробування приладів і тестових структур. Така ж тісна співпраця потрібна після створення моделі на завершальному етапі підбору немодельованих параметрів при верифікації моделі. Також зазначимо, що модель повинна забезпечити насамперед функціональну відповідність між експериментом та результатами моделювання.

Фізико-топологічні моделі. Найзручніше класифікацію фізико-топологічних моделей провести на прикладі моделей субмікронного ПТШ, одного з найбільш типових приладів НВЧ. При цьому наведена класифікація не претендує на повноту і строгість у дотриманні класифікаційної ознаки, а лише відображає ситуацію, що склалася в практиці моделювання.

Серед великої кількості різних моделей [24] ПТШ можна виділити чотири типи, що відрізняються рівнем моделювання.

Аналітичні моделі ґрунтуються на співвідношеннях, отриманих в результаті наближеного аналізу основних рівнянь перенесення електронів і рівнянь поля. Типовими є моделі [24–26], що використовують припущення про чітку межу збідненої області

під затвором та її повне збіднення, про одновимірний характер перенесення заряду в каналі й стаціонарний характер дрейфового руху. Останнє припущення не дозволяє використовувати ці моделі для субмікронних транзисторів. Відповідним вибором апроксимації поле-швидкісної характеристики $v(\mathcal{E})$ можна розширити межу моделювання до довжини затвора 0,5...0,7 мкм, проте точність моделювання залишається невисокою. В аналітичних моделях зазвичай розраховують параметри схемної моделі із зосередженими параметрами, а потім вже визначають Y - або S -параметри і шумові параметри. Останні розраховують за допомогою еквівалентних шумових джерел, що включаються у схемну модель. Фізична інформативність моделей цього рівня невелика, проте вони є економічними з погляду обчислювальних витрат.

Квазідвовимірні моделі [27–29] ґрунтуються на чисельному розв’язку системи одновимірних диференціальних рівнянь, що описують процеси уздовж каналу, а інформація про збіднення області у наближенні різкої або плавної [29] межі включається в систему рівнянь. Принциповою відмінністю цього рівня моделей є те, що в початкову систему входять диференціальні рівняння для імпульсу й енергії електронів, що дозволяють моделювати динаміку нестаціонарного дрейфового руху (ефект сплеску швидкості). Це дає змогу застосовувати ці моделі для субмікронних транзисторів з довжиною затвора до 0,2 мкм. Час моделювання в малосигнальному аналізі в частотній області досить невеликий, що дозволяє отримувати функціональні залежності схемних параметрів від електричного режиму в широкому діапазоні живильної напруги. Це робить можливим їх використання для режиму великого сигналу в часовій області [30] на високопродуктивних комп’ютерах. Важливою особливістю моделей цього рівня є вельми висока інформативність щодо фізичних процесів у транзисторі, оскільки в процесі чисельного інтегрування початкової системи розраховуються середні значення таких фізичних величин, як швидкість, енергія, напруженість електричного поля тощо.

Аналіз шумових параметрів транзисторів проводиться як і в аналітичних моделях, за допомогою схемної моделі, що включає еквівалентні шумові джерела струму або напруги. Проте особливості квазідвовимірних моделей дозволяють визначати реакцію вихідної напруги на флуктуації швидкості в каналі. Такий аналіз вимагає помітних витрат часу, але забезпечує досить високу точність моделювання шумових параметрів транзистора. Слід зазначити також, що моделі такого рівня можуть використовуватися для транзисторів, що мають прості профілі легування.

Двовимірні моделі в традиційному розумінні ґрунтуються на чисельному двовимірному інтегруванні системи фундаментальних (макроскопічних) рівнянь, яка включає рівняння Пуассона, рівняння неперервності й рівняння динаміки носіїв. Більшість наявних моделей, наприклад [31], побудовані у дрейфово-дифузійному наближенні, що не дозволяє аналізувати нестаціонарну динаміку носіїв, істотну для субмікронних транзисторів. Часто такі моделі позначають терміном «локальна» модель, при цьому передбачається, що в кожній точці простору швидкість носіїв «слідuje» за зміною напруженості електричного поля. Результатом моделювання фізичної частини моделі є часові і просторові розподіли середніх значень струму, електричного поля, швидкості тощо, тому моделі цього рівня відрізняються високою інформативністю. Звичайне моделювання проводиться в часовій області, і його результатом є перехідні характеристики, які за потреби можуть бути перераховані в параметри схемної моделі. Шумовий аналіз може бути проведений за допомогою локальних шумових джерел або температури, що розраховуються для кожного елемента двовимірної сітки, проте великі часові витрати вимагають подальшого вдосконалення цієї процедури. Адекватність двовимірних моделей може бути істотно покращена, якщо перейти до «нелокальної» моделі, доповнюючи систему релаксаційними рівняннями: рівняннями збереження енергії, імпульсу і частинок (концентрації).

Кінетичні моделі [32] належать до двовимірних лише за організацією області моделювання. Їх принципова відмінність від попередніх, які є детермінованими, полягає у використанні кінетичного рівняння Больцмана, що чисельно вирішується спільно з рівнянням Пуассона методом Монте-Карло. Статистичні кінетичні моделі дозволяють аналізувати рух колективу модельованих частинок як у координатному просторі, так і в просторі квазіімпульсів. Використовуючи ті або інші моделі зонної структури, механізми розсіювання, що характерні для певного матеріалу, через одиничні акти зіткнень, враховуючи за потреби деякі квантові ефекти, кінетичні моделі дозволяють відслідковувати «реальну» еволюцію всього колективу носіїв за заданого закону зміни напруги на електродах через динаміку кожної окремої частинки. На етапі обробки результатів моделювання за бажання можна відстежувати як повну функцію розподілу $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$, так і проводити вибірки і відповідні усереднювання в \vec{r} - і \vec{k} -просторі, аналізуючи особливості поведінки і внесок окремих груп електронів, наприклад, вплив процесів у підкладці, переходи електронів між долинами і подібні детальні ефекти. Шумовий аналіз не викликає принципових труднощів, оскільки під час розрахунку струмів через електроди флуктуації виявляються «природним» чином. Все це дозволяє вважати кінетичні моделі моделями найвищого рівня, які фізично повністю інформативні. Характерний час моделювання залежить від потрібної вихідної інформації.

Провівши аналіз моделей різного рівня з погляду їх використання в проектуванні, можна зазначити, що аналітичні моделі для субмікронних транзисторів мають обмежене використання й застосовуються в тих випадках, коли потрібна висока швидкодія та можна задовольнитися невисокою точністю моделювання. Для транзисторів зі складним профілем легування придатні лише двовимірні детерміновані та кінетичні моделі,

в яких інформація про реальний профіль вводиться як початкові дані. Ці ж моделі можна використовувати для проектування пристроїв дискретної схемотехніки, оскільки вони дозволяють моделювати реакцію транзистора на задані електричні дії. Зручніше це робити для кінетичних моделей, оскільки вони зазвичай використовують прямі методи інтегрування рівняння Пуассона. Загалом для цієї мети можливе створення і квазідвовимірних моделей, проте вони особливо зручні для малосигнального аналізу, помітно перевершуючи двовимірні моделі за швидкістю, що істотно в разі створення систем проектування аналогових транзисторних пристроїв.

Порівнюючи двовимірні детерміновані й кінетичні моделі, можна зазначити, що останні, поступаючись у швидкодії, мають переваги в інформативності, у точності моделювання (особливо специфіки субмікронних приладів і шумових властивостей). Це робить їх незамінними для дослідження процесів у транзисторах, для конструкторсько-технологічного проектування приладів, зокрема приладів із гетероструктурним каналом, транзисторів з проникною базою та інших приладів зі складною топологічною конфігурацією. Між тим, використання кінетичних моделей для сучасних субмікронних високолегованих біполярних структур з характерними розмірами шарів близько 0,1 мкм і необхідності усереднювання характеристик за умов великих градієнтів функцій може привести до зростання обчислювальних похибок і додаткових обчислювальних витрат. У системах автоматизованого проектування кінетичні й двовимірні моделі можуть мати обмежене використання через великий час моделювання. Для цього з успіхом можна використовувати квазідвовимірні моделі, що дають прийнятну точність і порівняно високу швидкість. До переваг цих моделей слід віднести також простоту врахування ефектів третього виміру [33–36]: топологічних неоднорідностей і розподілених ефектів.

Схемні моделі. Розрахунок вихідних характеристик ПТШ, таких як матриці провідності й розсіювання, коефіцієнт підсилення, матриця спектральної густини потужності шуму, мінімальний коефіцієнт шуму та ін., пов'язаний з аналізом реакцій (у вигляді струмів і напруги на електродах транзистора) на деякі тестувальні дії. Відклики на електродах у вигляді часових залежностей або приростів струмів і напруги отримуються на основі фізико-топологічної моделі відповідного рівня і схемної моделі.

Залежно від рівнів вхідних сигналів можливі різні режими роботи ПТШ – від лінійного (малосигнальний режим), коли зміни вхідного сигналу відбуваються в малому околі робочої точки за електричним режимом, до істотно нелінійного, коли амплітуда вхідного сигналу може бути порівнянною з напругою живлення (режим великого сигналу).

І в першому, і в другому випадку можливе подання транзистора у вигляді схемної моделі. Ця модель є деякою електричною схемою, що містить пасивні елементи і залежні джерела струму (напруги), що відображають реакцію окремих областей структури транзистора на вхідні тестувальні дії.

Зазвичай така схема включає елементи, що описують активну область транзистора (провідність каналу, залежне від вхідної напруги джерело струму з керувальним параметром, рівним крутизні вольт-амперної характеристики, а також вхідну і прохідну ємність); омичні опори пасивних ділянок каналу та омичних контактів стоку й витоку; опір металізації затвора; паразитні ємнісні й індуктивні елементи зовнішніх областей структури транзистора. Остання група параметрів може бути знайдена з експерименту, електродинамічного аналізу, або розрахована з експериментальних параметрів матриці розсіювання із залученням процедури оптимізації.

Вихідні характеристики у вигляді, наприклад, матриці провідності транзистора розраховуються відомими методами аналізу електронних схем. У цьому разі транзистор подають у вигляді

еквівалентного чотириполюсника з відповідною провідністю і залежними джерелами струму.

У режимі великого сигналу описана схемна модель транзистора містить нелінійні елементи (наприклад, діоди). Аналіз моделі в цьому випадку полягає у використанні методів, типових для динамічних систем.

Зазначимо, що аналіз транзистора на основі схемної моделі (у вигляді деякої «еквівалентної» схеми) має низку недоліків, основні з яких – неоднозначність такого опису (існує деяка множина «еквівалентних схем», що задовільно описують вихідні характеристики), а також труднощі ідентифікації «зовнішніх» по відношенню до активної області транзистора параметрів схемної моделі, вплив яких посилюється із розширенням робочого діапазону частот.

Строго кажучи, подання транзистора у вигляді схемної моделі справедливе в тій мірі, наскільки справедливе одновимірне фізико-топологічне моделювання структури транзистора (коли в каналі неістотними є поперечні складові електричного поля). У разі, коли поздовжні й поперечні розміри каналу транзистора порівнянні, опис транзистора у вигляді схемної моделі із зосередженими параметрами має великі похибки.

Істотною перевагою схемного моделювання реакції транзистора на вхідну тестувальну дію є можливість надійної ідентифікації параметрів схемної моделі з експериментальних залежностей, не пов'язаних з діапазоном надвисоких частот. За потреби ті або інші компоненти схемної моделі можна розглядати як частотнозалежні.

У загальному випадку для аналізу «двовимірних» структур із застосуванням двовимірних фізико-топологічних моделей використовується подання транзистора у вигляді деяких чотириполюсників, на вхід яких подається тестувальна дія у вигляді «одиночної» ступінчастої часової функції струму або напруги, а потім за відомою реакцією на виході (перехідною

характеристикою) розраховують частотні характеристики схеми з використанням процедури швидкого перетворення Фур'є.

Останній підхід зазвичай вимагає великих обчислювальних витрат, проте дозволяє отримати найбільш адекватні часові залежності на виході. Врахування «зовнішніх» паразитних елементів зумовлює збільшення часу встановлення вихідних величин, тобто використання моделей високого рівня не позбавляє від проблем ідентифікації паразитних елементів і вимагає розвитку методів електродинамічного аналізу цих елементів.

Одним із найважливіших аспектів моделювання малощумних пристроїв є розробка шумових моделей, що дозволяють описувати джерела шуму різної природи і містять алгоритми аналізу шумових характеристик у системі хвильових шумових параметрів, зручній для аналізу НВЧ-багатополюсників, які дозволяють розраховувати мінімальний коефіцієнт шуму та оптимальний імпеданс входу і виходу. Розрахунок мінімального коефіцієнта шуму транзистора пов'язаний із спільним використанням сигнальних і шумових параметрів (матриці розсіювання і матриці спектральної густини потужності шуму), а також з оптимальним вибором живильної напруги. Оптимізація параметрів структури транзистора приводить до цільової функції, що є поверхнею з великою множиною локальних екстремумів, і вимагає розробки спеціальних процедур мінімізації.

Формальні моделі. Найбільші труднощі й витрати викликає моделювання в часовій області параметрів ПТШ, що працює в режимі великого сигналу. Безпосереднє використання двовимірних фізико-топологічних моделей, що дозволяють розраховувати часові характеристики для аналізу НВЧ-пристроїв засобами систем автоматизованого проектування, невинновдане через великі обчислювальні витрати. Зазвичай у САПР використовують апроксимації залежностей нелінійних елементів від електричного режиму, або часових чи частотних

характеристик. Такий підхід дозволяє для заданої топології приладу й обраного робочого режиму побудувати формальні моделі вказаних залежностей у вигляді апроксимацій (наприклад, степеневим рядом або поліномом), що істотно підвищує ефективність аналізу і не вимагає звернення до фізичних моделей для розрахунку пристроїв.

Апроксимація може бути одно- або багатовимірною, неперервною чи кусковою. Можливе поєднання лінійних і нелінійних апроксимацій окремих залежностей або характеристик.

Створення бібліотеки формальних моделей пов'язане на попередньому етапі з надійною ідентифікацією параметрів схемної моделі або реакції (відклику) на виході. Ця задача може розв'язуватися або через проведення вимірювань, або багаторазовим розрахунком за фізико-топологічними моделями різного рівня. Кількість розрахункових точок залежностей, що апроксимуються, залежить від рівня вхідного сигналу (ступеня нелінійності), а також вимог до точності апроксимуючих поліномів.

Найбільш перспективними для побудови формальних апроксимуючих процедур є квазідвовимірні фізико-топологічні моделі. Такі моделі, по-перше, не вимагають значних обчислювальних витрат, а по-друге, використовують наближення схемної моделі, що дозволяє розраховувати необхідні залежності схемних параметрів у заданому робочому діапазоні, легко тестовані за низькочастотними вимірюваннями у малосигнальному наближенні.

Особливим класом формальних моделей є *макромоделі*, у яких пристрій в цілому або прилад подають у вигляді деякої електричної схеми, що містить ідеальні електричні компоненти, які описують керувальні, передавальні, імпедансні та інші характеристики модельованого пристрою або приладу. Зазвичай формальна схемна модель (макромодель) містить істотно менше компонентів, ніж схемна модель, що відображає фізичний зміст процесів у модельованих пристроях і приладах.

Макромоделі вимагають мінімальних обчислювальних витрат під час аналізу й легко вбудовуються в САПР.

Для моделювання цифрових схем використовують логічні формальні моделі, що не використовують електричних величин і фізичних констант, а відображають функціонування на логічному рівні.

Урахування у формальних моделях зовнішніх збурювальних чинників (температури, радіації, шумів тощо) здійснюється через введення в модель додаткових апроксимуючих залежностей або аналітичних функцій, що враховують відповідну дію.

1.6.2. Система моделювання субмікронних компонентів

Створення нових компонентів пов'язане з розробкою і верифікацією різних математичних моделей для опису фізичних процесів в активних напівпровідникових структурах. При цьому можливі різні підходи до моделювання, використання моделей субмікронних структур різного рівня, їх комплексна взаємодія та обмін даними. Завдання полягає у створенні цілісної *системи моделювання субмікронних приладів* та аналізі можливих методів моделювання [37] з урахуванням їх адаптації до об'єкта моделювання [38; 39].

Основні рівняння математичних моделей ґрунтуються на аналізі рівнянь для знаходження функції розподілу (кінетичне рівняння Больцмана), рівнянь збереження частинок, імпульсу та енергії з урахуванням перерозподілу носіїв між долинами для їх наступного використання для опису фізичних процесів у субмікронних приладах на основі багатодолинних напівпровідників, включаючи арсенід галію, фосфід індію, нітрид галію та ін.

У сфері моделювання напівпровідникових приладів НВЧ склалася ситуація, яка характеризується, з одного боку, великою різноманітністю моделей, а з другого, широким спектром задач, що потребують використання таких моделей. У зв'язку

з цим виникає потреба систематизувати моделі та вимоги, що висувають до них. Актуальним є коло питань, пов'язаних зі створенням системи моделювання твердотільних приладів НВЧ, зокрема субмікронних польових транзисторів з бар'єром Шотткі, гетероструктурних транзисторів, і надалі – малошумних та потужних пристроїв на їх основі.

Для чисельного моделювання пристроїв, що містять субмікронні компоненти, доцільним вважається підхід, що полягає в побудові ієрархічного ряду математичних моделей, призначених для завдань опису фізичних ефектів і процесів, удосконалення технології та конструкцій приладів, схемотехнічного аналізу й розрахунку характеристик пристроїв за різних рівнів входної дії та режимів роботи. У цьому разі моделі можуть відрізнятися не лише за своїм призначенням, але і методами моделювання, рівнем строгості, прийнятими припущеннями і необхідними обчислювальними витратами. Наявність усієї ієрархічної низки моделей дозволяє, наприклад, використовувати результати фізичного моделювання для визначення параметрів та апроксимацій для більш простих моделей, а останні, у свою чергу, можуть задавати хороше початкове наближення для постановки завдань проектування і дослідницьких задач у субмікронних структурах.

Ядром системи моделювання може бути блок моделей приладів, що відображає специфіку певної системи (рис. 1.11). Все різноманіття моделей доцільно розмістити в певний ієрархічний ряд. Вихідні дані для моделювання зосереджені в бібліотеці матеріалів і містять інформацію, що отримується безпосередньо з електронних і фононних законів дисперсії та параметрів кристалічної ґратки певної речовини.

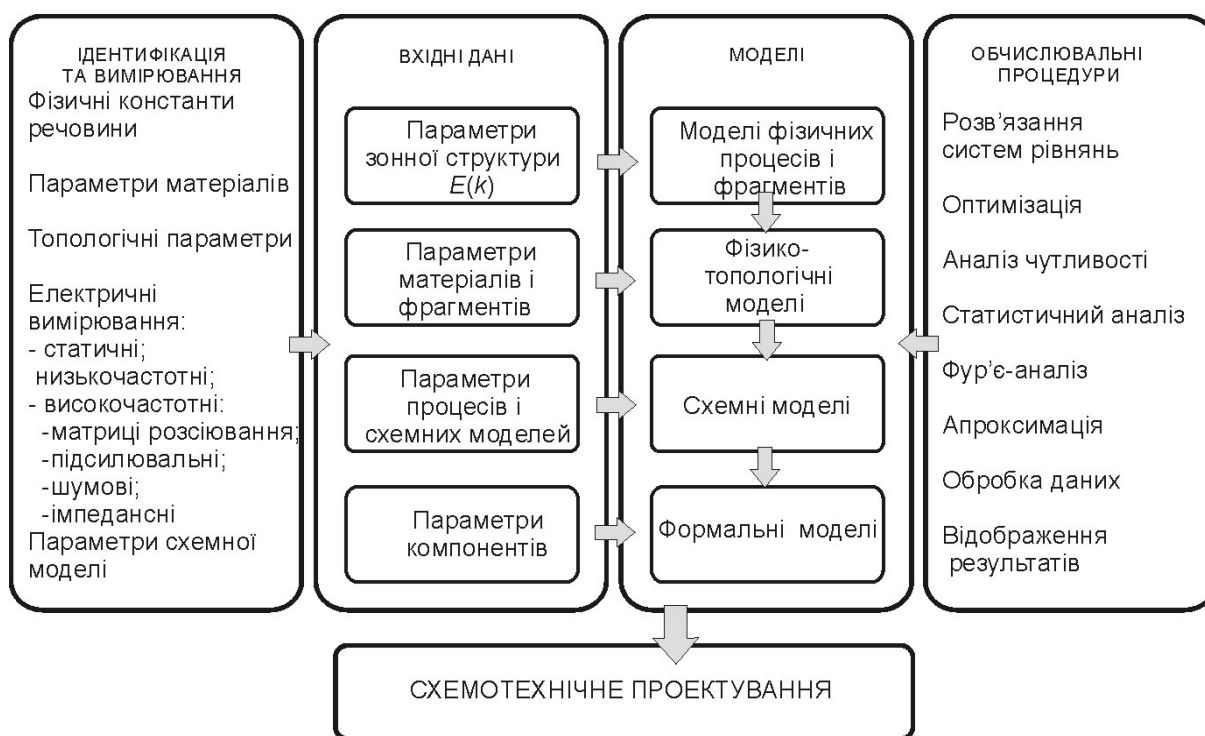


Рис. 1.11. Структурна схема системи моделювання субмікронних приладів

Окремою задачею є ідентифікація паразитних параметрів напівпровідникових структур, вплив яких стає дедалі більш суттєвим зі зменшенням розмірів активних областей до субмікронних і нанорозмірів. Задачу вирішують через моделювання і вимірювання характеристик тестових структур.

До верхнього ряду належать моделі фізичних процесів, які визначають поле-швидкісні характеристики, заселеність долин, часи релаксації тощо, а також моделі окремих фрагментів приладів, таких як моделі омичних контактів, шарів металізації, бар'єрів Шотткі, гетеропереходів тощо. У результаті моделювання на цьому рівні визначаються електрофізичні константи матеріалів, а також допоміжні параметри структур, що не входять в активну область приладу і тому зазвичай не модельовані на приладовому рівні; отримана інформація разом із топологічними й електричними даними є початковою для фізико-топологічного моделювання приладів.

Серед наявних фізико-топологічних моделей приладів, у свою чергу, можна виділити моделі різного рівня і встановити

певну класифікацію. Але всі вони, хоч і різною мірою, дозволяють отримувати фізичну інформацію про процеси, що відбуваються у приладі, через розподіли носіїв, полів, швидкостей, струмів та інших величин у просторі і, можливо, в часі. Ця інформація цікава для розуміння процесів у приладі і, крім того, використовується для знаходження схемних електричних параметрів приладу або його окремих фрагментів. Характеристика використовуваної схемної моделі (у вигляді схеми із зосередженими параметрами і керованими джерелами, розподіленої моделі у вигляді багатополюсника) залежить як від типу приладу, так і від особливостей його використання (частотний діапазон, величина вхідного сигналу, сфера застосування тощо).

У системах проектування пристроїв часто зручно використовувати формальні моделі характеристик приладів у вигляді числових таблиць або функцій, що апроксимують різного роду залежності, отримані у процесі фізико-топологічного моделювання.

Найважливішою складовою частиною, що значною мірою визначає спектр вирішуваних завдань, є блок процедур. Він являє собою набір програм, що реалізує типові методи, використовувані у практиці моделювання і проектування. Серед них можуть бути як стандартні, універсальні, так і спеціалізовані, передбачені для вирішення певних завдань (особливо завдання відображення результатів моделювання). Крім зручності, графічне подання результатів необхідне для аналізу великих масивів інформації, наприклад, у процесі моделювання багаточастинковим методом Монте-Карло, а також в інших статистичних моделях, у двовимірному моделюванні фізичних процесів.

Функціонування всієї системи визначається організацією роботи окремих програм. Основні вимоги до неї: гнучкість у формуванні маршруту моделювання залежно від вирішуваного завдання, передавання даних між окремими рівнями моделей

та інтерактивне введення даних, зручне подання результатів. Інтерактивне введення даних, по-перше, забезпечує можливість використання блока моделей з будь-якого рівня і, по-друге, введення додаткових даних, що не моделюються на попередньому рівні.

Необхідним доповненням до системи моделювання є вимірювання. Підключення цього блока до машинної системи проблематичне, оскільки серед типових для приладів НВЧ видів вимірювань лише деякі можуть проводитися автоматизовано. Тому функціонування цього блока здійснюється автономно, що не виключає використання окремих машинних програм для обробки результатів вимірювань. Основна роль вимірювань зводиться до створення інформаційного забезпечення для системи моделювання, тобто передбачає отримання вихідних даних для моделей того або іншого рівня чи отримання додаткових результатів, що не моделюються на більш високому рівні. Досить численні вимірювання необхідні також для верифікації моделей.

Проведений аналіз стосується насамперед фізичної частини моделей, а не моделювання схемних параметрів транзисторів. Досвід показує, що схемні параметри як інтегральні не настільки чутливі до похибок моделювання деталей фізичних процесів. Вибираючи модель, треба також враховувати, що, по-перше, паразитні елементи транзистора не включаються в область моделювання і потрібні додаткові способи їх визначення для використання фізико-топологічних моделей, а по-друге, для розрахунку Y - або S -параметрів на низьких частотах потрібен дуже тривалий (сотні пікосекунд або декілька тисяч часових кроків кінетичної моделі) період спостереження перехідного процесу. Це, безумовно, обмежує їх використання під час проектування транзисторних пристроїв, коли потрібне багаторазове звернення до моделі.

Необхідним є спільне використання моделей різного рівня під час проектування. Таких варіантів може бути запропоновано

багато, залежно від цілей проектування, наявної обчислювальної техніки тощо. Одним із простих є попереднє визначення за допомогою кінетичних або двовимірних моделей параметрів для простіших моделей (квазідвовимірних, аналітичних, апроксимаційних) з наступним їх використанням для аналізу або оптимізації. Подібні варіанти можуть бути використані й під час конструкторсько-технологічної розробки транзисторів, коли дуже висока фізична інформативність кінетичних і двовимірних моделей може виявитися надлишковою.

Для адекватного аналізу фізичних процесів і оптимізації характеристик необхідно створити ієрархічний ряд математичних моделей субмікронних приладів різного рівня і визначити функціональні особливості їх застосовності до завдань адаптивного проектування.

Рекомендована література: [1]; [2]; [3]; [4]; [5]; [6]; [7]; [8]; [9]; [10]; [11]; [12]; [13]; [14]; [15]; [16]; [17]; [18]; [19]; [20]; [21]; [22]; [23]; [24]; [25]; [26]; [27]; [28]; [29]; [30]; [31]; [32]; [33]; [34]; [35]; [36]; [37]; [38]; [39].

2. НАПІВПРОВІДНИКОВІ МАТЕРІАЛИ

2.1. Зонна структура напівпровідників

Напівпровідникові властивості мають прості речовини: бор В, вуглець (графіт) С, кремній Si, германій Ge, олово (сіре) Sn, фосфор Р, арсен As, сурма Sb, сірка S, селен (червоний) Se, телур Те, йод J. До напівпровідників належать також бінарні сполуки типу A_xB_{8-x} , де А – елемент групи x , а В – елемент групи $(8-x)$. Найбільш поширені й застосовні з них – речовини типу $A^{III}B^V$, до яких належать сполуки азоту (нітриди), фосфору (фосфіди), арсену (арсеніди), сурми (антимоніди) з елементами третьої групи (бору, алюмінію, галію, індію). Перспективними є сполуки типу $A^{II}B^{VI}$, а також $A^{IV}B^{IV}$. Напівпровідникові властивості проявляють потрібні й складніші сполуки, а також деякі органічні речовини.

2.1.1. Атомарні напівпровідники

Традиційно в електроніці широко використовують атомарні напівпровідники германій і кремній. Структура верхніх оболонок цих атомів, а також інших атомів цієї підгрупи IV групи, має вигляд ns^2np^2 . Через близьке енергетичне розташування s - і p -рівнів ці атоми чотиривалентні. Об'єднуючись у кристал за допомогою ковалентних зв'язків, вони утворюють ґратку типу алмазу. Вона містить дві підґратки із гранецентрованих кубічних комірок, зсунутих одна відносно одної на чверть діагоналі куба (рис. 2.1). У такому кристалі кожен атом пов'язаний з чотирма найближчими атомами. У кожному зв'язку беруть участь два електрони, по одному від кожного атома, що характерне для ковалентного зв'язку.

Розглянемо особливості зонної структури найбільш поширених напівпровідникових матеріалів. Зазначимо, що в різних джерелах вигляд і параметри дисперсійних кривих інколи помітно відрізняються, що може пояснюватися як відмінністю в методах обчислення цих кривих, так і різним ступенем їх

деталізації. Незважаючи на ці відмінності розглянемо тільки найбільш істотні особливості законів дисперсії.

Періодичність закону дисперсії електронів у кристалі уможлиблює його зображення в межах тільки першої зони Бріллюена. Для ґратки типу алмазу вона має вигляд октаедра із зрізаними вершинами (рис. 2.2); тут же показано, як такими фігурами можна заповнити весь k -простір. Замість проєкцій хвильового вектора на основні напрямки, задані числовим набором кристалографічних індексів, зазвичай використовують іншу систему позначень. У ній характерні точки і лінії симетрії у зоні Бріллюена позначають літерами, а закон дисперсії задають у вигляді одновимірної функції уздовж тих чи інших напрямків між двома точками. Центр зони Бріллюена зазвичай позначають літерою Γ , напрямки, еквівалентні $[100]$, – Δ , а відповідні їм шість точок на поверхні зони – X . Вісім напрямків, еквівалентних $[111]$, позначають літерою – Λ , а точки їх перетину з поверхнею – L .

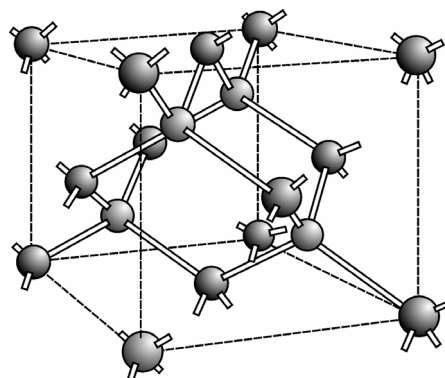


Рис. 2.1. Кристалічна структура алмазу, що складається з двох гранецентрованих кубічних підґраток

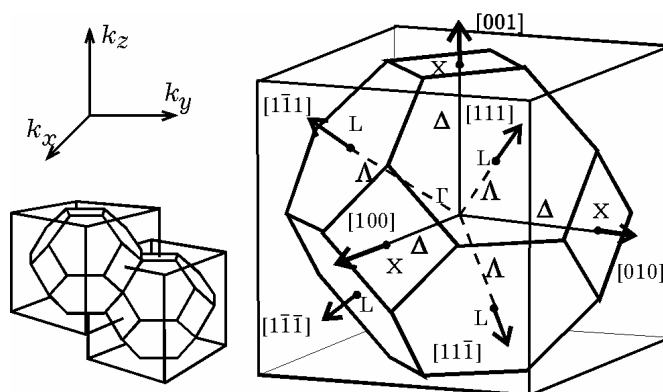


Рис. 2.2. Форма першої зони Бріллюена для кристалічної ґратки типу алмазу і позначення характерних точок та напрямків симетрії [1]

Кремній. Вигляд дисперсійних кривих кремнію для двох напрямків хвильового вектора зображено на рис. 2.3. Хвильові

функції електронів і відповідні їм дисперсійні криві для валентної зони утворюються з хвильових функцій електронів в атомних s - і p -станах у результаті sp^3 -гібридизації. Їм відповідають три криві на рис. 2.3. Одна з гілок лежить біля нижнього краю валентної зони і на рисунку не позначена. Максимум енергії валентної зони вироджений і міститься у центрі зони Бріллюена для двох гілок, для третьої за рахунок спин-орбітальної взаємодії він опускається на 0,035 еВ. Різна кривизна цих гілок у максимумі дає підставу говорити про різну ефективну масу рухливих носіїв: для «легких» дірок $m_{pl}^* \approx 0,16m$, для «важких» $m_{pt}^* \approx 0,5m$. Для обчислення ефективної густини станів біля краю валентної зони зручно користуватися деякою усередненою масою:

$$m_{pd}^* = (m_{pl}^{*3/2} + m_{pt}^{*3/2})^{2/3} \approx 0,56m.$$

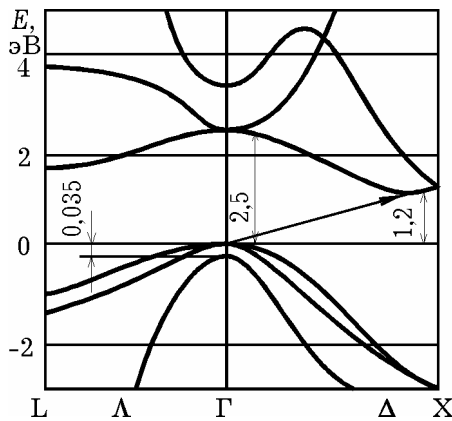


Рис. 2.3. Дисперсійні криві в зоні провідності та валентній зоні кремнію в Δ - і Λ -напрямах.

Відстань між абсолютними екстремумами кривих відповідає забороненій зоні

Структура зони провідності складніша, ніж структура валентної зони. Абсолютний мінімум у зоні провідності має одна з гілок у Δ -напрямку на відстані 0,855 відрізка Γ -X. Беручи до уваги симетрію зони Бріллюена (рис. 2.2), можна вважати, що цей мінімум складається з шести еквівалентних мінімумів, або, як часто їх називають, долин. На рис. 2.4 ці долини зображено у вигляді ізоенергетичних поверхонь, які мають форму еліпсоїда обертання.

Оскільки напівосі еліпсоїда характеризують компоненти тензора ефективної маси, зручно говорити про *поздовжню* і *поперечну* ефективну масу електронів, які для кремнію відповідно мають значення $m_l^* \approx 0,98m$ та $m_t^* \approx 0,19m$. Для визначення питомої електропровідності користуються деякою усередненою скалярною величиною ефективної маси, яку називають *омічною* і зворотну

величину якої знаходять як середнє арифметичне із зворотних значень ефективних мас для трьох напрямків, тому $m_c^* = 3m_t^*m_l^* / (2m_l^* + m_t^*) \approx 0,26m$. Наявність шести еквівалентних долин біля дна зони провідності означає шестикратне збільшення кількості станів. Це враховують, зберігаючи незмінним вигляд виразу для функції розподілу густини станів і використовуючи *ефективну масу густини станів* як середнє геометричне з компонентів тензора ефективної маси, помножене на коефіцієнт $M^{2/3}$. Для кремнію $M = 6$, тому $m_d^* = 6^{2/3}(m_t^{*2}m_l^*)^{1/3} \approx 1,08m$. Ширина забороненої зони для кремнію різна в різних точках зони Бріллюена. У центрі зони за $k = 0$ вона становить приблизно 2,5 еВ. Відстань між абсолютними екстремумами, тобто для кремнію відстань від максимуму валентної зони в точці Γ до мінімуму зони провідності у Δ -напрямку, дорівнює приблизно 1,2 еВ за абсолютного нуля і приблизно 1,1 еВ за кімнатної температури, зменшуючись зі зростанням температури. Для кімнатних температур іноді вважають, що $\Delta E(T) = \Delta E(0) + \alpha T$, де температурний коефіцієнт ширини забороненої зони $\alpha = -4 \cdot 10^{-4}$ еВ/К.

З погляду положення абсолютного мінімуму в зоні провідності кремній належить до *непрямозонних* напівпровідників. Це означає, що отримавши енергію, яка дорівнює мінімальній відстані між зонами, валентний електрон може здійснити перехід у зону провідності, якщо змінюється також і значення його квазіімпульсу. Такий перехід, позначений стрілкою на рис. 2.3, називають *непрямим*. Прямий перехід здійснюється без зміни квазіімпульсу і вимагає більшої енергії. Важливим параметром з погляду емісійних і контактних властивостей є енергія

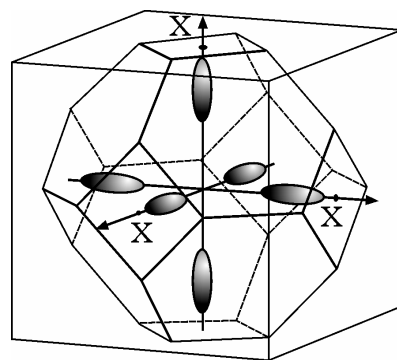


Рис. 2.4. Розміщення ізоенергетичних поверхонь, які відповідають X-долинам біля дна зони провідності кремнію, у першій зоні Бріллюена

електронної спорідненості, яка визначається як відстань від дна зони провідності до рівня вакууму і для кремнію дорівнює 4,05 еВ.

Германій. Закони дисперсії та структура енергетичних зон германію багато в чому подібні до кремнію. Валентна зона (рис. 2.5) має вироджений максимум у центрі зони Бріллюена і характеризується наявністю «легких» і «важких» дірок ($m_{pl}^* = 0,04m$; $m_{pt}^* = 0,34m$), що відповідає ефективній масі густини станів $m_{pd}^* = (m_{pl}^{*3/2} + m_{pt}^{*3/2})^{2/3} \approx 0,36m$. Третя гілка віддалена від краю зони на величину енергії спин-орбітальної взаємодії, яка дорівнює 0,28 еВ.

Найбільш істотна відмінність германію від кремнію полягає в тому, що абсолютний мінімум зони провідності лежить на межі першої зони Бріллюена в точці L. Ізоенергетичні поверхні, які відповідають цьому мінімуму, зображено на рис. 2.6, вони мають вигляд еліпсоїдів обертання. Довгі осі цих еліпсоїдів розміщені в Λ -напрямок симетрично під кутом $\arcsin(\sqrt{2}/\sqrt{3})$ відносно Δ -напрямку. Отримати значення омічної ефективної маси в цьому напрямку через поздовжні й поперечні ефективні маси можна, використовуючи відповідне перетворення тензора ефективної маси: $m_c^* = 3m_t^*m_l^* / (2m_l^* + m_t^*)$. Анізотропія ефективної маси для германію виражена ще сильніше ($m_l^* = 1,58m$, $m_t^* = 0,08m$), тому скалярне значення омічної ефективної маси $m_c^* \approx 3m_t^*/2 \approx 0,12m$. Ефективна маса густини станів електронів у зоні провідності $m_d^* = 4^{2/3} (m_t^{*2}m_l^*)^{1/3} \approx 0,56m$ враховує наявність восьми еквівалентних долин, кожна з яких лежить лише наполовину в першій зоні Бріллюена (рис. 2.6), тому $M = 8/2 = 4$.

Ширина забороненої зони германію в центрі зони Бріллюена становить 1,1 еВ. Відстань між абсолютними екстремумами енергетичних зон дорівнює 0,78 еВ за нульової температури і 0,66 еВ за кімнатної. Температурний коефіцієнт ширини забороненої

зони фактично такий самий, як і кремнію, енергія електронної спорідненості германію становить 4,0 еВ.

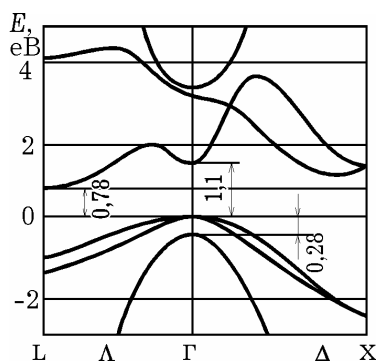


Рис. 2.5. Дисперсійні криві в зоні провідності й валентній зоні германію в Λ - і Δ -напрямку. Ширина забороненої зони германію – відстань між абсолютними екстремумами кривих

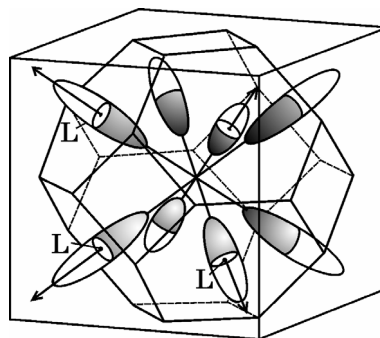


Рис. 2.6. Ізоенергетичні поверхні, які відповідають L-долинам біля дна зони провідності германію. Еліпсоїди обертання лежать лише наполовину в першій зоні Бріллюена

Сполуки $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ є сплавом кремнію і германію з їх процентним вмістом, що задається параметром x . Кристалічна ґратка, маючи вигляд ґратки алмазу, містить велику кількість дефектів, викликаних випадковим розміщенням атомів кремнію і германію. Структура енергетичних зон має спільні ознаки, властиві й кремнію, і германію. Дисперсійні криві в зоні провідності містять ті самі характерні долини, проте їх розміщення залежить від складу сполук. Природно, що за крайніх значень $x = 0$ і $x = 1$ зонна структура набуває відповідно вигляду для чистого германію або кремнію. Зі збільшенням вмісту кремнію положення долин змінюється як показано на рис. 2.7: швидко зростає рівень дна Γ - і L -долини та порівняно плавно X -долини. Для $x = 0,15$ положення X - і L -долини вирівнюються й ширина забороненої зони становить 0,86 еВ. З наступним збільшенням частки кремнію вона поступово наближується до значення 1,11 еВ.

У роботі [40] наведено апроксимації, що визначають положення відповідних долин щодо стелі валентної зони:

$$E_X = a_1 + b_1x + c_1x^2, \text{ де } a_1 = 0,86; b_1 = -0,0658; c_1 = 0,318;$$

$$E_L = a_2 + b_2x + c_2x^2, \text{ де } a_2 = 0,635; b_2 = 1,505; c_2 = 0,1205;$$

$$E_\Gamma = a_3 + b_3x, \text{ де } a_3 = 0,805; b_3 = 2,615.$$

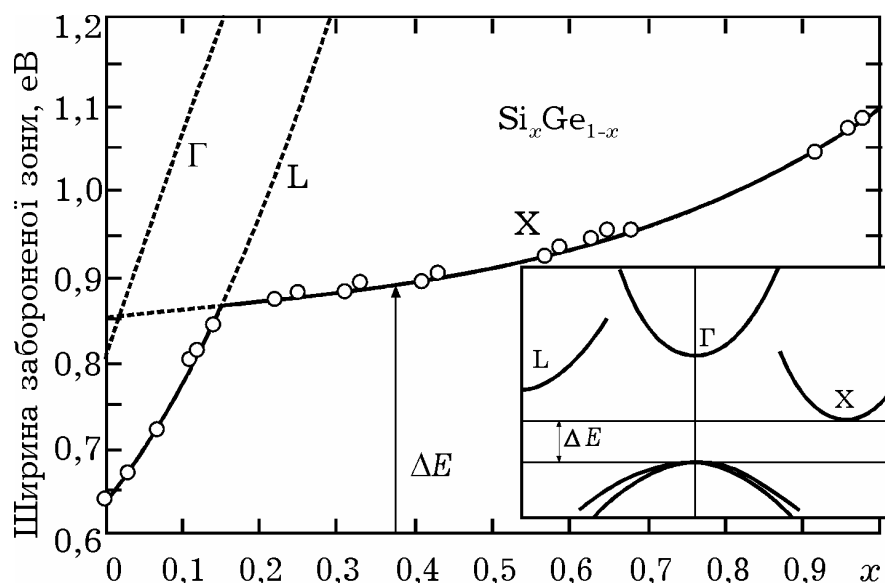


Рис. 2.7. Енергетичне положення долин у зоні провідності $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ залежно від частки кремнію, відраховане від стелі валентної зони

2.1.2. Бінарні напівпровідники $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$

Різноманіття властивостей сполук типу $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ зумовлює їх широке використання у приладах і пристроях різного технічного призначення. Сполуки типу $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ є найближчими електронними аналогами кремнію і германію. Вони утворюються у результаті взаємодії елементів III-б підгрупи періодичної таблиці (бору, алюмінію, галію, індію) з елементами V-б підгрупи (азотом, фосфором, арсеном і сурмою). Вісмут і талій не утворюють сполук цього ряду. Сполуки $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ прийнято класифікувати за металічним елементом. Відповідно, розрізняють нітриди, фосфіди, арсеніди й антимоніди.

Для сполук $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ характерний особливий тип хімічного зв'язку – донорно-акцепторний. З чотирьох ковалентних зв'язків, якими кожен атом вбудовується в ґратку, три утворюються усупільненням валентних електронів атомів A^{III} , а четвертий зв'язок здійснюється неподіленою парою валентних атомів B^{V} . Утворення цього зв'язку відповідає енергетично вигідному переходу електронів від атома B^{V} в енергетичний надлишок, спільний для донора (атомів B^{V}) й акцептора

(атома A^{III}). У кожному ковалентному зв'язку максимум електронної густини зміщений у бік атома з вищою електронною негативністю, тобто електронна густина стягнута до вузлів ґратки з атомами B^{V} . Завдяки такій поляризації зв'язків атоми A^{III} набувають деякого ефективного додатного заряду, атоми B^{V} – від'ємного. Значення цього ефективного заряду визначає ступінь іонності сполуки, який закономірно змінюється з переходом від однієї сполуки до іншої [41] відповідно до положення хімічних елементів у періодичній таблиці Д. І. Менделєєва.

Напівпровідникові сполуки $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ утворюють гомологічний ряд, у якому спостерігається закономірна зміна багатьох властивостей у разі зміни атомних номерів компонентів. Ці закономірності наведено в табл. 2.1.

Таблиця 2.1. Параметри напівпровідників типу $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ [42]

Сполука	Період ґратки, $\times 10$, нм	Густина, мг/мм ³	Температура плавлення, °C	Твердість ¹⁾	$A \times 10^6$, K ⁻¹ 2)	Ширина забороненої зони, eV	Рухливість електронів, м ² /(В·с)	Рухливість дірок, м ² /(В·с)	Показник заломлення за $h\nu = \Delta E$	Діелектрична проникність ³⁾
BN _(куб)	3,615	3,49	3000	10	–	6,0	–	–	2,1	7,1
AlN	3,110 4,975	3,28	2400	7	6,1	5,88	–	–	2,2	9,1
GaN	3,186 5,176	6,11	1700	–	5,65	3,40	0,03	–	2,4	12,2
InN	3,540 5,704	6,91	1100	–	–	1,95	–	–	2,9	–
AlP	5,463	2,37	2000	5,5	4,2	2,45	0,008	0,003	3,0	9,8
GaP	5,451	4,07	1467	5	5,9	2,26	0,019	0,012	3,45	11,1
InP	5,869	4,78	1070	–	4,6	1,35	0,46	0,015	3,45	12,4

Закінчення табл. 2.1

Сполука	Період ґратки, ×10, нм	Густина, мг/мм ³	Температура плавлення, °C	Твердість ¹⁾	$A \times 10^6, K^{-1} 2)$	Ширина забороненої зони, eV	Рухливість електронів, м ² /(В·с)	Рухливість дірок, м ² /(В·с)	Показник заломлення за $h\nu = \Delta E$	Діелектрична проникність ³⁾
AlAs	5,661	3,60	1770	5	5,2	2,16	0,02	–	3,2	10,1
GaAs	5,653	5,32	1237	4,5	6,4	1,43	0,8	0,045	3,65	13,1
InAs	6,058	5,67	942	4	5,3	0,36	0,95	0,046	3,52	14,6
							3,3			
AlSb	6,136	4,28	1060	4,8	4,2	1,58	0,02	0,055	3,4	14,4
GaSb	6,096	5,65	710	4,5	6,2	0,72	0,4	0,14	3,8	15,7
InSb	6,479	5,78	525	3,8	4,9	0,18	7,8	0,075	4,0	17,7

¹⁾ Твердість за мінералогічною шкалою.²⁾ Температурний коефіцієнт лінійного розширення.³⁾ Низькочастотна діелектрична проникність.

Точки плавлення лежать вище відповідних температур плавлення елементів, з яких складається сполука, за винятком антимоніду індію, температура якого (525 °C) лежить між температурою плавлення сурми (630 °C) та індію (157 °C).

Усередині кожної групи сполук спостерігається зменшення ширини забороненої зони із зростанням сумарного атомного номера та атомних мас елементів, що входять у з'єднання. Це пояснюється сильнішим розмиттям «електронних хмар» ковалентних зв'язків з переміщенням вниз по періодичній таблиці, завдяки чому посилюється металічний характер зв'язку. Одночасно з ослабленням ковалентних хімічних зв'язків знижується температура плавлення і твердість матеріалу, тобто напівпровідник стає пластичнішим [4]. Це ілюструє рис. 2.8, де для кубічної структури кристалічної ґратки подані поверхні, що відповідають положенням дна зони провідності у точках симетрії Γ , L та X, побудовані за даними, наведеними в роботі [43]. Слід звернути увагу, що взаємне розміщення Γ -, L- і X-долини може змінюватись залежно від хімічного складу.

Прямозонними напівпровідниками будуть сполуки індію та галію (окрім GaP). Сполуки алюмінію та фосфіду галію мають дно зони провідності у точці X.

За винятком нітридів усі сполуки $A^{III}B^V$ кристалізуються у ґратках (рис. 2.9) кубічного типу (цинкової обманки, сфалериту). Для гранецентрованої кубічної ґратки типу цинкової обманки, як і алмазу, перша зона Бріллюена має вигляд октаедра із зрізаними вершинами (рис. 2.9). Її симетрія дозволяє задавати закон дисперсії лише в межах $1/64$ частини зони Бріллюена.

Для нітридів характерна також структура гексагонального типу (вюрцит) (рис. 2.10). У ґратках обох типів кожен атом елемента III групи перебуває в оточенні тетраедра чотирьох атомів елемента V групи і навпаки. Структура сфалериту, на відміну від структури алмазу, не має центру симетрії, що пояснює відмінності у властивостях поверхонь $[111]$ і $[110]$, цілком складених з різнойменних атомів. Різна поведінка граней виявляється під час травлення, окиснення та вирощування кристалів.

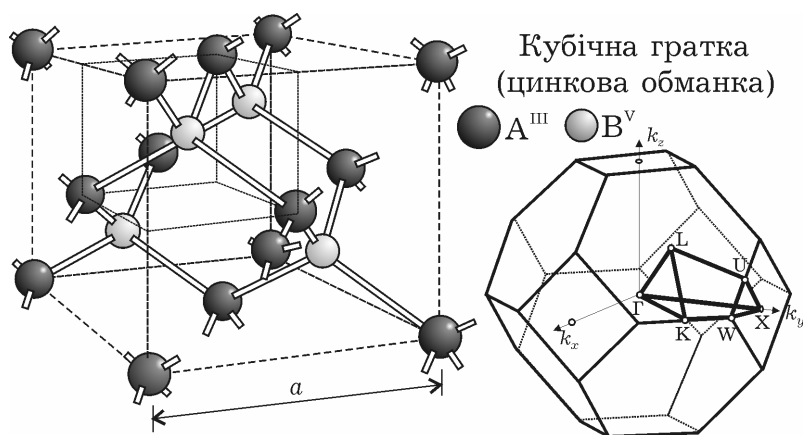


Рис. 2.9. Структура кубічної кристалічної ґратки типу цинкової обманки та форма першої зони Бріллюена. Виділено мінімальний елемент симетрії – $1/64$ частину зони

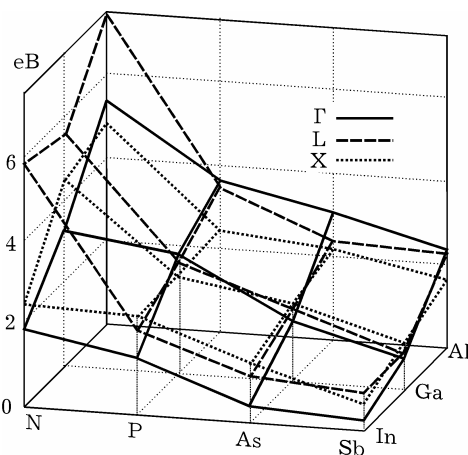


Рис. 2.8. Залежності ширини забороненої зони у різних точках симетрії (Γ , L та X) зони Бріллюена від складу сполуки

Розглянемо особливості зонної структури найбільш перспективних з погляду швидкодії напівпровідникових матеріалів GaAs, GaN та InP [43; 44].

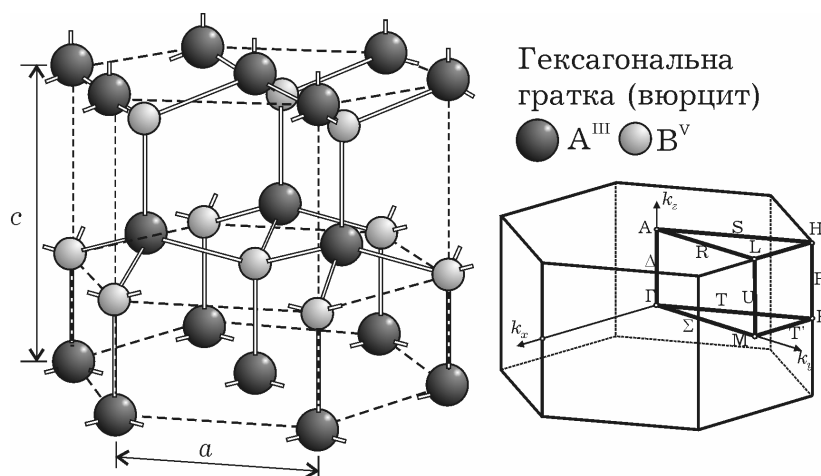


Рис. 2.10. Структура гексагональної кристалічної ґратки типу вюрциту та форма першої зони Бріллюена. Виділено найменший елемент симетрії – $1/24$ частину зони

Арсенід галію GaAs є найбільш уживаним напівпровідником із групи сполук $A^{III}B^V$.

У структурі енергетичних зон атомарних напівпровідників IV групи і сполук $A^{III}B^V$ багато спільного. Так, наприклад, характер дисперсійних кривих у валентній зоні арсеніду галію якісно аналогічний германію і кремнію. У центрі зони (рис. 2.11) містяться максимуми двох гілок, яким відповідають «легкі» ($m_{рл}^* \approx 0,1m$) і «важкі» ($m_{рв}^* \approx 0,5m$) дірки. Третя гілка за рахунок спин-орбітальної взаємодії лежить нижче на 0,33 еВ.

На відміну від германію і кремнію, арсенід галію є *прямозонним* напівпровідником, тобто абсолютний мінімум зони провідності міститься у центрі зони Бріллюена (точка Γ). Для GaAs відстань між екстремумами становить за нульової температури 1,5 еВ, зменшуючись до 1,45 еВ за кімнатної. Ефективна маса електрона поблизу абсолютного екстремуму (у Γ -долині) є скалярною величиною ($m^* \approx 0,067m$), оскільки відповідні ізоенергетичні поверхні майже сферичні.

Однією з найбільш яскравих особливостей арсеніду галію є наявність верхньої долини на висоті близько 0,3 еВ від краю

зони провідності в L-напрямку. Ізоенергетичні поверхні біля дна цієї долини є еліпсоїдами обертання, ще більш витягнутими, ніж для германію. Це говорить про велику відмінність поздовжньої і поперечної ефективних мас, які, відповідно, мають такі значення: $m_l^* = 1,9m$; $m_t^* = 0,075m$.

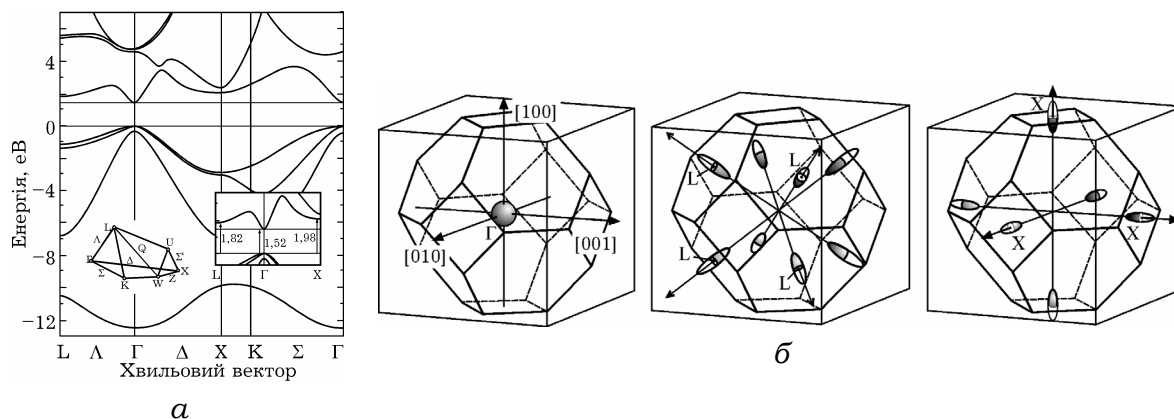


Рис. 2.11. Закон дисперсії для арсеніду галію (а): фрагмент дисперсійної кривої біля краю забороненої зони з енергетичними положеннями (eВ) нижчих долин, а також мінімальний елемент симетрії зони Бріллюена; ізоенергетичні поверхні для нижчих долин (б): Γ-долина майже ізотропна

Так само, як і в германії, розраховують омічну ефективну масу $m_c^* \approx 3m_t^*/2 \approx 0,11m$ й ефективну масу густини станів $m_d^* = 4^{2/3} (m_t^{*2} m_l^*)^{1/3} \approx 0,56m$. З цією особливістю Γ- і L-долини пов'язаний ефект виникнення від'ємної диференціальної рухливості. У зоні провідності GaAs є й вищі долини, наприклад, на відстані близько 0,5 eВ у X-напрямку, але помітний вплив на електричні властивості вони мають тільки за наявності сильного електричного поля. Енергія електронної спорідненості становить 4,07 eВ.

Нітриди III групи («тринітриди») періодичної системи Менделєєва можуть мати кристалічну структуру сфалериту, вюрциту та кам'яної солі.

Нітрид галію має дві модифікації кристалічної структури: кубічну, подібну до ґратки для арсеніду галію або ґратки типу «цинкової обманки», і гексагональну типу «вюрциту». Для кубічних ґраток взято параметри зонної структури, наведені

в роботах [43, 44], для якої в зоні провідності в точках симетрії зони Бріллюена є Γ -, X - і L -долина (рис. 2.12, а). Дну зони провідності відповідає центральна Γ -долина з ізотропною ефективною масою $m_{\Gamma}^* = 0,13m$. Наступні шість X -долин перебувають на енергетичній відстані $\Delta_{\Gamma X} = 1,3$ еВ на краю зони Бріллюена. Їм відповідає помітна анізотропія ефективних мас $m_l^*/m_t^* = 0,5/0,3$, при цьому омічна ефективна маса $m_c^* = 0,35m$, а ефективна маса густини станів, із врахуванням кількості долин ($M_X = 6/2$), $m_d^* = M^{2/3} \sqrt[3]{m_t^{*2} m_l^*} = 0,76m$. Більш високі L -долини містяться на 2,3 еВ вище, ніж Γ -долина.

Для гексагональної структури кристалічної ґратки також характерно, що мінімум зони провідності перебуває у центрі зони Бріллюена (рис. 2.12, б), де ефективна маса є ізотропною і становить $(0,19...0,21)m$ [45]. Але крім цього мінімуму в центрі зони є ще одна Γ -долина, вища за першу на $(1,9...2,2)$ еВ. Проте щодо положень верхніх долин у науковій літературі немає єдиної думки. Деякі автори вважають, що наступною є долина, розміщена між точками L і M на висоті від 1,2 до 2,0 еВ, інші такою вважають A -долину – $(1,3...2,1)$ еВ [46]. Фактично немає інформації щодо ефективної маси у верхніх долинах, іноді її вважають рівною звичайній масі. Ізотропна ефективна маса для верхньої Γ -долини становить $(0,9...1)m$ [47]. Важливим параметром з погляду емісійних і контактних властивостей є енергія електронної спорідненості, яка визначається як відстань від дна зони провідності до рівня вакууму і для нітриду галію дорівнює 4,1 еВ [46].

Нітрид алюмінію AlN так само, як і нітрид галію, кристалізується як у структуру цинкової обманки, так і в гексагональну структуру типу вюрциту.

Кубічний нітрид алюмінію, на відміну від нітриду галію, є непрямоzonним напівпровідником (рис. 2.12, в), абсолютний мінімум зони провідності лежить в точці X на відстані 4,9 еВ від максимуму валентної зони [47].

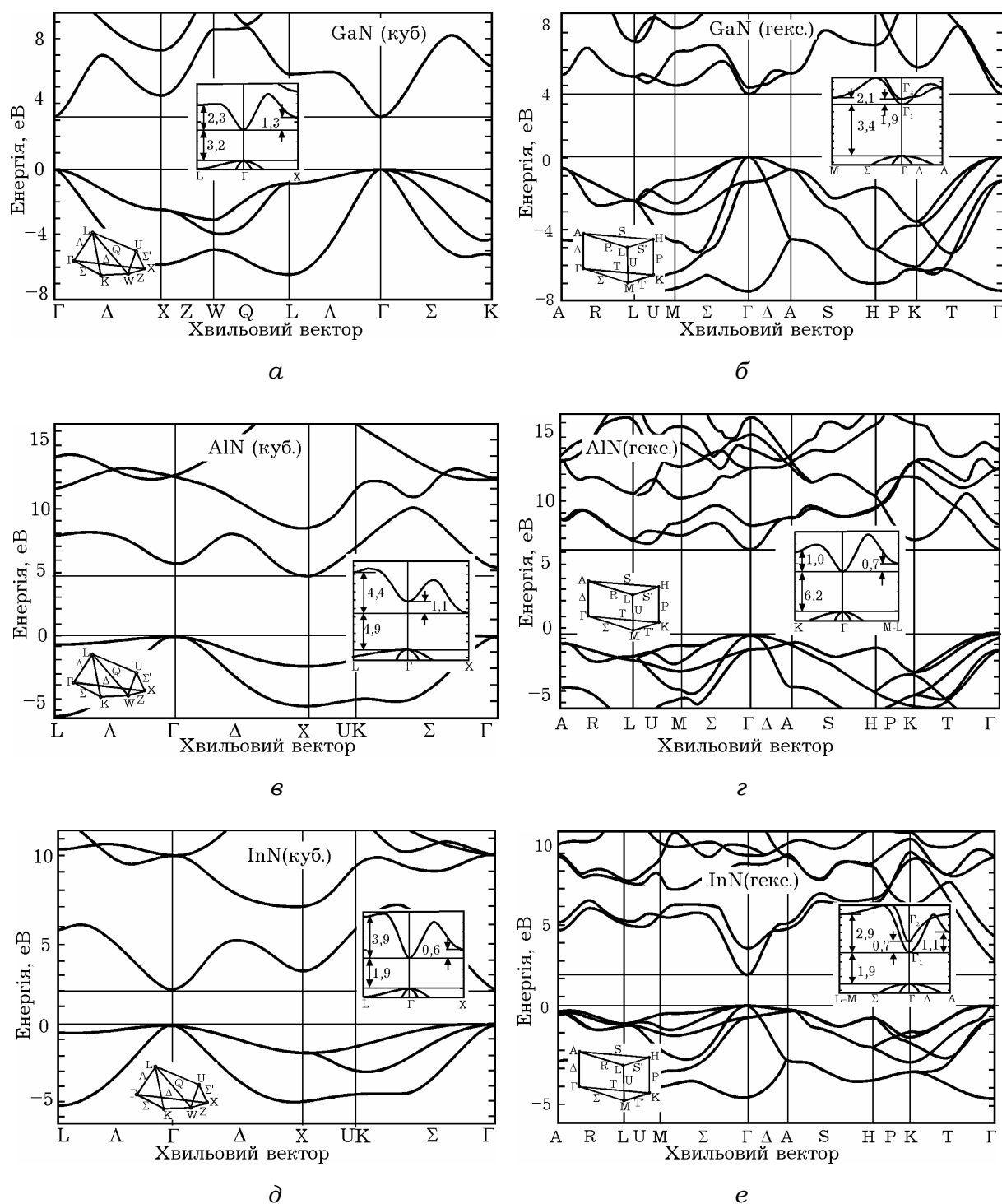


Рис. 2.12. Закон дисперсії для нітридів з кубічною (*a*, *в*, *д*) та гексагональною (*б*, *г*, *е*) структурою кристалічної ґратки. На вставках зображено фрагменти дисперсійних кривих біля країв забороненої зони з параметрами, що використовувались для розрахунків, а також мінімальний елемент симетрії зони Брілюєна з характерними напрямками та точками симетрії

Ширина забороненої зони, що відповідає центральній Γ -долині, становить приблизно 6 еВ, у ній ефективна маса є ізотропною і дорівнює $0,4m$. На енергетичній відстані $\Delta_{\Gamma L}$ біля

4,0 еВ перебувають ще чотири еквівалентні L-долини. Анізотропія ефективної маси в них виражена фактично так само, як і для GaN ($m_l^* = 0,53m$, $m_t^* = 0,35m$) [44], тому скалярне значення омічної ефективної маси $m_c^* = 0,4m$. Ефективна маса густини станів електронів у зоні провідності $m_d^* = 4^{2/3}(m_t^{*2}m_l^*)^{1/3} \approx 0,79m$. Енергія електронної спорідненості становить лише 0,6 еВ [46].

Нітрид алюмінію типу *вюрциту* має закон дисперсії (рис. 2.12, *г*) у загальних рисах подібний до гексагонального нітриду галію і є прямозонним напівпровідником, на відміну від своєї кубічної модифікації.

Ще одна особливість нітриду алюмінію – його ширина забороненої зони, яка становить у центрі зони Бріллюена 6,2 еВ (Г-долина) [44]. Нітрид алюмінію є найбільш широкозонним напівпровідником сполук $A^{III}B^V$. На енергетичній відстані 0,7 еВ міститься наступна L-M-долина. Враховуючи, що для вюрцитної модифікації AlN $m_l^* = 0,35m$, $m_t^* = 0,29m$, то ефективна маса густини станів в одній долині дорівнює $0,17m$ [44]. Також на краю зони Бріллюена, але у Δ -напрямку на відстані 1,0 еВ лежать шість еквівалентних K-долин з ефективною масою густини електронних станів з урахуванням всіх долин $1,02m$. Енергія електронної спорідненості становить лише 0,6 еВ [46]. Через те, що нітрид алюмінію викликав загальну зацікавленість своєю шириною забороненої зони і виключними електронними властивостями порівняно недавно, відомості щодо зонної структури нітриду алюмінію в літературі часто різняться.

Нітрид індію типу цинкової обманки є прямозонним напівпровідником і за структурою дисперсійної кривої (рис. 2.12, *д*) подібний до кубічного GaN. Для кубічного нітриду індію характерна в зоні провідності в точках симетрії зони Бріллюена послідовність Г-, Х- та L-долини.

Абсолютний мінімум зони провідності лежить у центрі зони Бріллюена (точка Г). Для InN відстань між екстремума-

ми за нульової температури становить 2,0 еВ, зменшуючись до 1,9 еВ за кімнатної. Ефективна маса електрона поблизу абсолютного екстремуму (у Γ -долині) є скалярною величиною ($m^* \approx 0,12m$) [46].

Наступна X-долина перебуває на енергетичній відстані $\Delta_{\Gamma X} = 0,57$ еВ в середині зони Бріллюена. Їй відповідають значення поздовжньої та поперечної ефективних мас: $m_l^* = 0,48m$; $m_t^* = 0,27m$ [43], при цьому омічна ефективна маса $m_c^* = 0,32m$, ефективна маса густини станів з урахуванням кількості долин $m_d^* = 0,52m$.

Структура зони провідності для *гексагонального* нітриду індію дещо складніша (рис. 2.12, e) та ще більш невизначена. У роботі [46] наведено ширину забороненої зони, яка залежно від температури має значення близько 2 еВ. За статтею [47] це значення становить 0,65...0,7 еВ. Дну зони провідності відповідає центральна Γ_1 -долина з майже ізотропною ефективною масою, що дорівнює $(0,04...0,07)m$. Як і для гексагонального GaN, через брак точних експериментальних даних у літературних джерелах думки дослідників різняться щодо параметрів, і відповідно, до послідовності долин у зоні провідності InN типу вюрциту. Одні автори вважають наступною A-долину, що розміщена у Δ -напрямку на енергетичній відстані 0,7...2,7 еВ. Інші вважають такою другу Γ_2 -долину, розміщену також у центрі зони Бріллюена вище на 1,1...2,6 еВ [45; 46]. Їм відповідає значна анізотропія ефективних мас $m_l^*/m_t^* = 0,84/0,16$, тому скалярне значення омічної ефективної маси $m_c^* \approx 3m_t^*/2 \approx 0,24m$, а ефективна маса густини станів в одній долині $m_d^* = 0,28m$. Констатують і наявність вищих долин у зоні провідності InN, що лежать між точками L і M на висоті $\Delta_{\Gamma ML} = 2,9...3,9$ еВ [46], з ефективною масою густини станів з урахуванням усіх долин

1,08*m*. Енергія електронної спорідненості для цього матеріалу невідома.

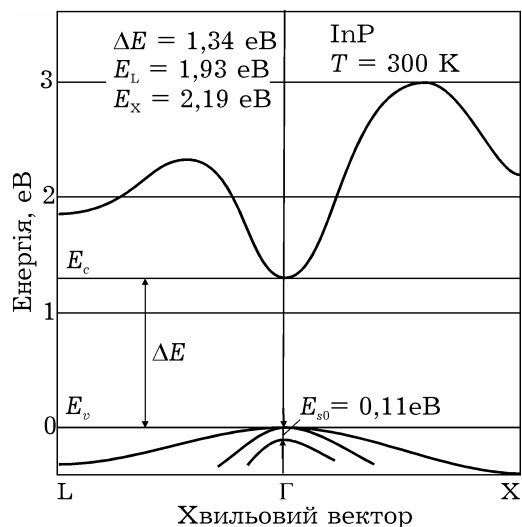


Рис. 2.13. Закон дисперсії для фосфіду індію (реконструйовано з [46]): характерною є Γ X-послідовність долин у зоні провідності

Фосфід індію має закон дисперсії (рис. 2.13), у загальних рисах подібний до такого в арсеніді галію. Ширина забороненої зони становить 1,34 еВ. У зоні провідності найнижчою є центральна Γ -долина з фактично ізотропною ефективною масою, що дорівнює (0,064...0,08)*m* [43; 46]. На енергетичній відстані 0,59 еВ перебувають вісім L-долин на краю зони Бріллюена з ефективною масою густини станів в одній долині

0,25*m*, або з урахуванням усіх долин 0,63*m*. Також на краю зони Бріллюена, але в Δ -напрямку, на відстані 0,85 еВ лежать шість X-долин з ефективною масою густини електронних станів відповідно 0,32*m* та 0,66*m*. Енергія електронної спорідненості становить 4,38 еВ.

2.1.3. Складні сполуки $A^{III}B^V$

Широко застосовують в електроніці потрійні сполуки матеріалів A^{III} та B^V , наприклад InGaAs, AlGaIn, InAsP тощо. Не розглядаючи всього різномайття цих сполук (достатньо повний огляд їх властивостей можна знайти в роботах [43; 44]), деякі тенденції визначимо на прикладі $Al_xGa_{1-x}As$. Це з'єднання можна розглядати як сплав бінарних арсенідів Al та Ga, частка яких визначається параметром x . Із зростанням x від нуля до одиниці властивості сполуки поступово змінюються від таких для чистого GaAs до чистого AlAs. Насамперед це стосується зміни зонної структури (рис. 2.14).

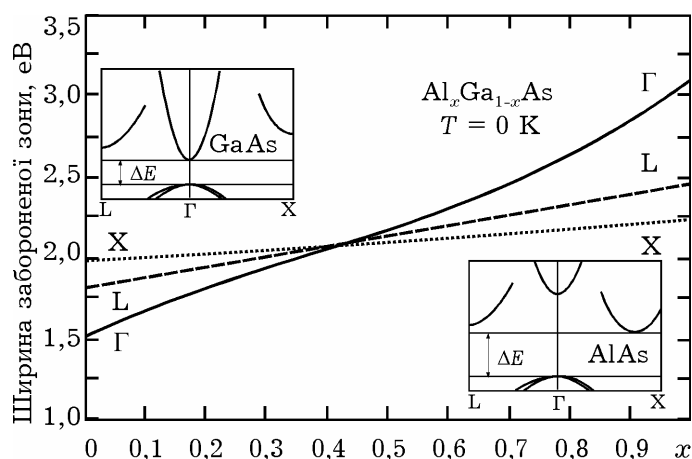


Рис. 2.14. Енергетичне положення долин у зоні провідності $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, відмічене від стелі валентної зони, залежно від частки алюмінію. На вставках зображено ескізи законів дисперсії для чистих матеріалів

На відміну від арсеніду галію арсенід алюмінію є непрямозонним напівпровідником, в якому найнижчою є X-долина на відстані 2,17 еВ від валентної зони. Точніше, її мінімум міститься на деякій відстані від краю зони Бріллюена в Δ -напрямку. Зі збільшенням частки алюмінію положення долин змінюється: вони підіймаються, але по-різному, так що послідовність ΓLX -у GaAs змінюється на послідовність $\text{XL}\Gamma$ - в AlAs . Цікавою особливістю сполуки є те, що за $x = 0,45$ положення всіх долин збігається.

У статті [47] наведено апроксимації, що визначають зміну положення відповідних долин щодо стелі валентної зони від частки алюмінію:

$$E_{\Gamma}(x) = 1,424 + 1,247x \text{ для } 0 < x < 0,45;$$

$$E_{\Gamma}(x) = 1,424 + 1,247x + 1,147(x - 0,45)^2 \text{ для } 0,45 < x < 1,0;$$

$$E_{\text{L}}(x) = 1,708 + 0,642x;$$

$$E_{\text{X}}(x) = 1,900 + 0,125 + 0,143x^2.$$

Зазначимо, що ці дані наведено для $T = 300 \text{ K}$, а на рис. 2.14 – для $T = 0 \text{ K}$. Зазвичай для температурної залежності ширини забороненої зони для різних долин ($i = \Gamma, \text{L}, \text{X}$) використовують співвідношення [43]

$$\Delta E_i(T) = \Delta E_i(0) - \frac{\alpha_i T^2}{T + \beta_i},$$

де α_i і β_i – *Varshni*-параметри, які служать для апроксимації експериментальних залежностей.

Зі зміною частки алюмінію змінюється й кривизна дисперсійних кривих, яка визначає ефективну масу (табл. 2.2).

Таблиця 2.2. Лінійна апроксимація значень ефективної маси в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Позначення ефективної маси	Ефективна маса	
	густини станів	омічна
m_{Γ}^*/m_0	$0,067 + 0,083x$	$0,067 + 0,083x$
m_{L}^*/m_0	$0,56 + 0,1x$	$0,11 + 0,03x$
m_{X}^*/m_0	$0,85 - 0,14x$	$0,32 - 0,06x$

*Відтворено за [49].

Іноді для параметрів складних сполук використовують квадратичні апроксимації. Наприклад, для ширини забороненої зони з'єднання бінарних сполук А та В придатна білінійна форма

$$\Delta E(\text{A}_x \text{B}_{1-x}) = x\Delta E(\text{A}) + (1-x)\Delta E(\text{B}) - x(1-x)C,$$

де параметр C знаходять з результатів експерименту.

Такі співвідношення використовують і для більш складних, четверних сполук, які також можна розглядати як сплави простих бінарних сполук.

2.1.4. Фононні спектри

Найбільш визначальними для електронних властивостей напівпровідників, крім зонної структури, є особливості взаємодії електронів з тепловими коливаннями кристалічної ґратки.

У багатьох питаннях, пов'язаних з тепловими властивостями твердих тіл, виправдовує себе модель Дебая, відповідно до якої теплове збудження викликає не коливання окремих атомів, випадкові та незалежні одне від одного, а *хвильові* процеси зміщення атомів біля положення рівноваги, які поширюються в кристалічній ґратці як у одному цілому. Хвильові коливання ґратки, як і всі інші, квантуються, а кванти цих хвиль – *фонони* – розглядають як квазічастинки, що рухаються у кристалі зі швидкістю, яка відповідає груповій

швидкості хвильових процесів і в першому наближенні дорівнює швидкості звуку.

Спектр частот фононів визначається періодичністю структури та параметрами ґратки й описується законом дисперсії. Як і для електронних хвиль у кристалі, цей закон можна подати як функцію $\omega(\vec{k}_\phi)$ або $E(\vec{k}_\phi)$, де \vec{k}_ϕ – хвильовий (точніше, квазіхвильовий) вектор фононів. Ця функція, як і для електронного закону дисперсії, є парною та періодичною з періодом $2\pi/a$ (для одновимірного кристала), тому достатньо визначити її на половині зони Бріллюена.

З найпростішої моделі поширення коливань в одновимірному ланцюжку зв'язаних пружними силами однакових атомів з періодом a випливає закон дисперсії у вигляді [2]:

$$\omega(k_\phi) = \omega_m \sin \frac{k_\phi a}{2}, \quad (2.1)$$

де ω_m – гранична частота фононів (рис. 2.15, а), $\omega_m = 2v_{\text{зв}}/a$, яка залежить від швидкості поширення звуку в твердому тілі й відповідає найкоротшій довжині хвилі $\lambda_{\min} = 2a$, за якої сусідні атоми коливаються у протифазі. Такі коливання утворюють стоячу хвилю, групова швидкість якої $v_{\text{гр}} = d\omega/dk_\phi$ дорівнює нулю. Іноді цю граничну частоту характеризують *температурою Дебая* θ_D , яку визначають із рівності $\hbar\omega_m = k_B\theta_D$. Для типових напівпровідників період ґратки має значення порядку 10^{-10} м, швидкість звуку приблизно 10^3 м/с, тому граничні частоти мають порядок $10^{12} \dots 10^{13}$ Гц і лежать в ультразвуковій області, а температури Дебая становлять кілька сотень кельвінів. Для найнижчих частот закон дисперсії є лінійним ($\omega \approx \omega_m k_\phi a/2$), тому фазова і групова швидкості однакові й дорівнюють швидкості звуку. Такі коливання і, відповідно, фонони називають *акустичними*.

Для кристалів, елементарна комірка яких складається з двох атомів, закон дисперсії (рис. 2.15, б, в) має свої особливості – у ньому з'являється *оптична* гілка.

Зрозуміти її походження можна за допомогою відносно простої моделі (рис. 2.15, б). Для лінійного ланцюжка з однакових атомів, розміщених на відстані $a' = a/2$, справджується закон дисперсії (2.1), який, якщо замінити a' на a , дає значення ω_m у точках $k_\phi = \pm \pi/a' = \pm 2\pi/a$. Але цей інтервал удвічі перевищує розмір зони Бріллюена ($-\pi/a \leq k_\phi \leq \pi/a$) для кристала з періодом a . Тому після зведення закону дисперсії до першої зони Бріллюена, як це роблять для електронних хвиль [1], він набуває вигляду, показаного на рис. 2.15, в, де оптична гілка є продовженням акустичної, зміщеної на відстань $2\pi/a$.

Акустичні коливання поширюються у ланцюжку атомів як у єдиному цілому, а найбільш короткохвильові мають частоту $\omega_m/\sqrt{2}$ (як у точці $k_\phi = \pi/2a$ на рис. 2.15, а), коли на одному періоді ґратки вкладається половина довжини хвилі і $\lambda = \lambda_{\min} = 2a$. Ця точка вироджена і відповідає також нижній частоті оптичної гілки, де зі збільшенням частоти збільшується і довжина хвилі, а сусідні атоми однієї комірки коливаються у протифазі.

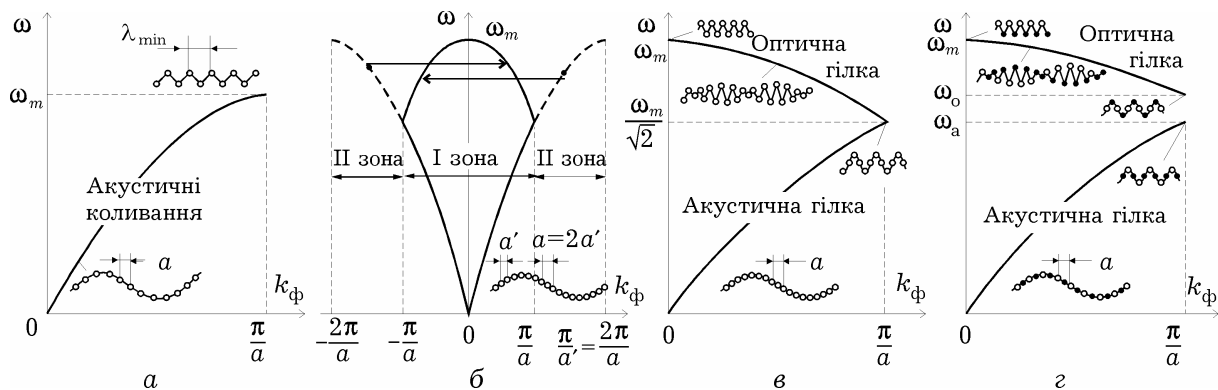


Рис. 2.15. Закони дисперсії хвиль зміщення в одновимірній моделі кристала – ланцюжку атомів: з одноатомним базисом (а), з базисом із двох однакових атомів (б, в) та двох різних атомів (г). Показано (б) утворення оптичної гілки для двохатомного базису зведенням верхньої частини «акустичної» гілки до першої зони Бріллюена (масштаб по горизонтальній осі зменшено). На фрагментах для зручності зображення поздовжні зміщення атомів подано як поперечні

Таку саму картину спостерігають і в ланцюжку з періодом, що складається з двох різнойменних атомів або однойменних, але з різною жорсткістю зв'язків зліва і справа від атома. Через це

в точці $k_{\text{ф}} = \pi/a$ виродження знімається (рис. 2.15, з), адже акустичні й оптичні коливання мають різні частоти, а у спектрі фононів утворюється розрив. Ці найбільш короткохвильові фонони (як акустичні, так і оптичні) іноді називають *міждолинними*.

У розглянутій одновимірній моделі можливі лише поздовжні види (*моди*) коливань, хоча на наведених рисунках (рис. 2.15) їх подано як поперечні. Це зроблено виключно для зручності зображення. У тривимірному кристалі крім поздовжніх існують ще й дві моди поперечних коливань, причому в кубічному кристалі обом поперечним модам відповідає один закон дисперсії. Дисперсійні криві для фононів у найпоширеніших напівпровідникових матеріалах: кремнії, германії, арсеніді галію [50] та нітриді галію [51], – зображено на рис. 2.16. Загальний вигляд цих кривих для поздовжніх мод (LA – акустична, LO – оптична) цілком відповідає наведеній вище моделі, тільки закон дисперсії описують функцією, складнішою за (2.1).

У кремнії та германії, елементарні комірки яких складаються з однакових атомів, гілки поздовжніх LA- та LO-моди вироджені на межі зони Бріллюена, а енергії міждолинних фононів становлять близько 0,05 та 0,03 еВ відповідно. Така помітна різниця пов'язана, насамперед, з різною масою атомів Si та Ge.

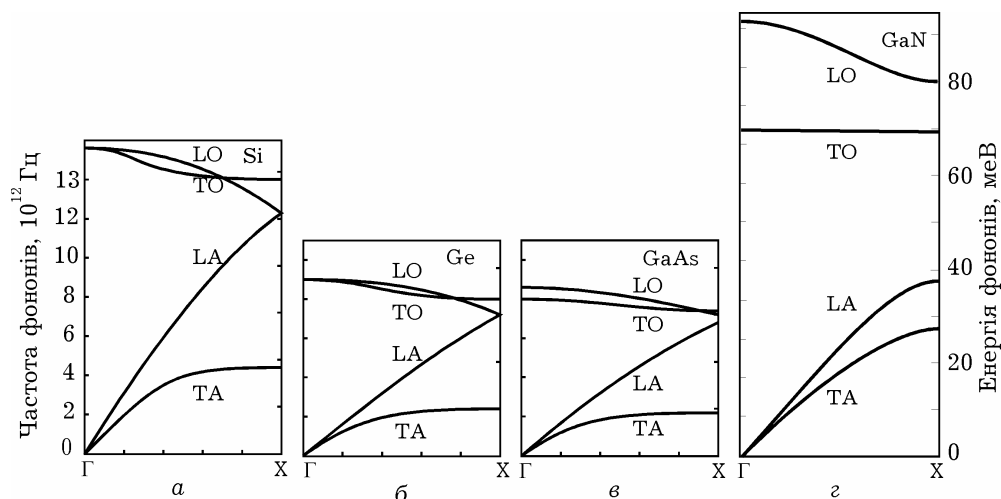


Рис. 2.16. Дисперсійні криві фононів для кремнію (а), германію (б), арсеніду галію (в) і кубічного нітриду галію (г) у кристалографічному напрямку [100]:

L – поздовжні; T – поперечні; A – акустичні; O – оптичні моди.

На правих шкалах показано енергію фононів, на лівих – їх частоту

В арсеніді галію виродження немає, але невелика різниця між масами атомів галію та арсену приводить і до невеликої розбіжності частот оптичної та акустичної мод: $\omega_o/\omega_a = \sqrt{M_{As}/M_{Ga}}$. В інших бінарних сполуках $A^{III}B^V$ через більшу різницю атомних мас підґраток це відношення може бути суттєво більшим. Так, наприклад, у нітриді галію (рис. 2.16, з) гранична частота оптичних коливань перевищує частоту акустичних більш ніж удвічі ($M_{Ga}/M_N \approx 5$).

На рис. 2.16. зображено також поперечні акустичні (ТА) й оптичні (ТО) гілки. У неполярних кристалах германію і кремнію поперечна та поздовжня оптичні моди вироджені за $k_\phi = 0$. У бінарних сполуках, де оптичні коливання викликають утворення дипольного електричного моменту, ці моди мають різні частоти, а за $k_\phi = 0$ виконується співвідношення

$$\frac{\omega_{LO}}{\omega_{TO}} = \sqrt{\frac{\epsilon_{ст}}{\epsilon_\infty}}, \quad (2.2)$$

де $\epsilon_{ст}$ і ϵ_∞ – відповідно статична і високочастотна діелектрична проникність.

Характерна особливість фононів, крім спектра, – це їх розподіл за енергіями. Середню кількість фононів $N_\phi(\omega)$ із заданою енергією (частотою) визначають як для безспінових частинок статистикою Бозе–Ейнштейна й обчислюють за формулою Планка:

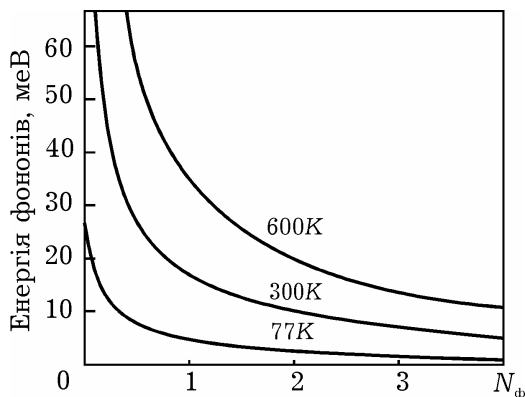


Рис. 2.17. Залежність середньої кількості фононів певної частоти від їх енергії за різних температур

$$N_\phi(\omega) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1}. \quad (2.3)$$

Залежність кількості фононів від їх енергії (рис. 2.17) показує, що за $\hbar\omega > k_B T$ кількість фононів $N_\phi \ll 1$. Ця умова зазвичай добре виконується для оптичних фононів за кімнатних температур.

Для довгохвильових акустичних фононів з частотами

$\hbar\omega \ll k_B T$ можна наближено вважати, що $N_\phi(\omega) \approx k_B T / \hbar\omega$, тобто їх кількість пропорційна температурі.

2.2. МЕХАНІЗМИ ТА ШВИДКОСТІ РОЗСІЮВАННЯ

Різноманітність та особливості ефектів перенесення носіїв у твердому тілі залежать не лише від конфігурації й величини зовнішніх полів, але й від фізичних особливостей конкретних механізмів співударянь, що приводять до розсіювання спрямованих потоків носіїв. Ці процеси вивчають у розділі фізики твердого тіла, який називають *теорією розсіювання*. Розглянемо лише характерні особливості деяких найважливіших механізмів розсіювання та принципи їх урахування в інтегралі зіткнень.

Насамперед слід пам'ятати, що поведінку електронів в *ідеальній* кристалічній ґратці описують хвильовими функціями у вигляді хвиль Блоха, які поширюються у кристалі як біжучі хвилі з постійною вздовж кристала амплітудою. Виникнення відбитих хвиль (тобто розсіювання електронів) можливе лише у разі порушення ідеальної періодичності поля кристала за наявності дефектів ґратки. Порушення періодичності можуть бути викликані двома основними причинами. Перша з них пов'язана зі стаціонарними, локалізованими у просторі структурними дефектами – домішками, межами, різними дислокаціями. Друга викликана тепловими коливаннями іонів у вузлах кристалічної ґратки відносно положення рівноваги. Незважаючи на те, що ці коливання являють собою *хвильові* збудження періодичної структури ґратки, які залежать від часу і просторово не локалізовані, розсіювання електронів на них розглядають як зіткнення з деякими квазічастинками – *фононами*, кількість яких може змінюватися внаслідок зіткнення. До таких дефектів належать також збудження в енергетичному спектрі електронів (екситони, плазмони), за певних умов помітним стає електрон-електронне та електрон-діркове розсіювання. Але найтипівіші дефекти – це домішкове розсіювання і різні види фононного розсіювання.

Ефективність співударень часто замість часу релаксації τ оцінюють оберненою величиною, яку називають *швидкістю розсіювання* – вона означає середню кількість актів розсіювання певного виду за одиницю часу. Її знаходять безпосереднім інтегруванням імовірності переходів за всіма кінцевими станами:

$$\lambda(k) = \frac{1}{\tau(k)} = \int w_{kk'} dV_{k'}. \quad (2.4)$$

Саме ці величини використовують у моделюванні методом Монте-Карло для визначення імовірності того чи іншого виду розсіювання. За наявності різних механізмів їх швидкості розсіювання підсумовують:

$$\lambda_{\Sigma} = \sum_i \lambda_i.$$

Це правило виконується, якщо різні акти розсіювання відбуваються незалежно один від одного.

2.2.1. Фононне розсіювання

Загальні закономірності фононного розсіювання. Під час взаємодії носія заряду з тепловими коливаннями кристалічної ґратки його енергія може збільшуватися або зменшуватися на величину кванта коливань ґратки, тобто енергії фонона. У цьому випадку говорять про *поглинання* або *збудження* фонона носієм заряду. Багатофононні процеси малоімовірні порівняно з однофононними, тому закон збереження енергії для фононного розсіювання має вигляд

$$E' - E = \pm \hbar \omega. \quad (2.5)$$

Крім того, має виконуватися закон збереження імпульсу (квазіімпульсу), який зручніше виражати через хвильові вектори:

$$\vec{k}' - \vec{k} = \pm \vec{k}_{\text{ф}}. \quad (2.6)$$

У формулах (2.5) і (2.6) штрихами позначено енергію та хвильовий вектор електрона після розсіювання, а знаки « \pm » стосуються відповідно поглинання фонона і його збудження.

Квантово-механічний аналіз процесів переходу між електронними станами дає вирази для ймовірностей розсіювання з поглинанням фонона електроном і з його збудженням:

$$w_{kk'}^{\pm} = w(\vec{k}_{\text{ф}}) \left(N_{\text{ф}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(E' - E \mp \hbar\omega), \quad (2.7)$$

де $w(\vec{k}_{\text{ф}})$ – деяка функція, що залежить від конкретного виду фононного розсіювання; δ -функція враховує закон збереження енергії; верхній знак стосується поглинання фонона, а нижній – його збудження.

Пропорційність імовірності кількості фононів $(N_{\text{ф}} + 1/2 \pm 1/2)$ свідчить про те, що швидкість розсіювання зі збудженням фононів у $(N_{\text{ф}} + 1)/N_{\text{ф}}$ разів більша, ніж із їх поглинанням. Однак це правило виконується повною мірою, по-перше, за достатньо великих енергій електрона, бо якщо $E < \hbar\omega$, то розсіювання може відбутися тільки з поглинанням фонона. По-друге, ця відмінність суттєва за звичайних температур для оптичних фононів, коли $\hbar\omega > k_{\text{Б}}T$ і $N_{\text{ф}} \ll 1$. Для акустичних, особливо довгохвильових ($k_{\text{ф}} \approx 0$) фононів $N_{\text{ф}} \gg 1$ і швидкості розсіювання з поглинанням і збудженням фактично однакові.

У кожному акті співударяння енергія електрона зменшується або збільшується на енергію фонона $\hbar\omega$, однак у середньому за рахунок переважання процесів збудження енергія електронів зменшуватиметься, а кристалічна ґратка нагріватиметься. Середня енергія, що її електрон втрачає за одне зіткнення, може бути визначена як енергія одного фонона, помножена на відношення різниці ймовірностей з випромінюванням і поглинанням до повної ймовірності, тобто їх суми:

$$\Delta E_1 = \hbar\omega \frac{w_{kk'}^{-} - w_{kk'}^{+}}{w_{kk'}^{-} + w_{kk'}^{+}}. \quad (2.8)$$

Відношення цієї величини до енергії електрона в середньому визначає частину переданої ґратці енергії, тобто ступінь пружності фононних співударянь, і називається *коефіцієнтом*

пружності ζ . Увівши поняття електронної температури за співвідношенням $E = 3k_B T_e / 2$, з урахуванням виразів (2.7) для ймовірностей розсіювання і (2.3) отримаємо:

$$\zeta = \frac{\Delta E_1}{E} = \frac{\hbar\omega}{E} \frac{1}{2N_\phi + 1} = \frac{2\hbar\omega}{3k_B T_e} \operatorname{th} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}. \quad (2.9)$$

За високих температур або малих енергій фононів, коли $\hbar\omega \ll k_B T$ (якщо замінити $\operatorname{th} x \approx x$), коефіцієнт пружності

$$\zeta \approx \frac{(\hbar\omega)^2}{3k_B T_e} \ll 1, \quad (2.10)$$

і такі співударяння можна вважати пружними.

Для оптичних фононів енергія може бути співмірною з величиною $k_B T$, тому їх взаємодія з електронами суттєво непружна. Однак зі збільшенням енергії електронів або електронної температури пружність співударянь зростає так, що коефіцієнт пружності зменшується обернено пропорційно T_e .

Акустичне розсіювання. У процесі акустичного розсіювання основну роль відіграє взаємодія електрона з поздовжніми коливаннями ґратки, які викликають зміни міжатомних відстаней. Хвильові процеси зміни параметра ґратки a приводять до відповідної зміни ширини забороненої зони. Оскільки довжина хвилі акустичних коливань, особливо для малих значень k_ϕ , помітно більша за міжатомну відстань, тут можна використати макроскопічну модель викривлення енергетичних зон. У цьому випадку говорять про локальну зміну енергії електрона в зоні провідності, яка пропорційна поздовжній деформації кристала, тобто відносній зміні міжатомної відстані,

$$\Delta E = D_a \left(\frac{\Delta a}{a} \right). \quad (2.11)$$

Коефіцієнт пропорційності D_a (розмірність еВ) називають *константою акустичного деформаційного потенціалу*, а саме розсіювання – розсіюванням на акустичному деформаційному потенціалі. Це розсіювання пов'язане з виникненням локальних електричних полів, що з'являються за рахунок зміни взаємодії

між атомами у результаті поздовжніх деформацій ґратки і викликають зміни траєкторії руху електрона.

Поперечні акустичні фонони пов'язані з деформаціями зсуву атомних шарів і майже не змінюють міжатомних відстаней, але можуть викликати п'єзоелектричний ефект. Однак *п'єзоелектричне розсіювання* у типових випадках набагато слабше за розсіювання на поздовжніх акустичних фонах.

Із сумісного розв'язку рівнянь балансу енергії та імпульсу випливає, що у розсіюванні беруть участь лише довгохвильові акустичні фонони, енергія яких помітно менша за енергію електронів, що дорівнює тепловій $-3k_B T/2$. Тому поглинання або випромінювання фонуна майже не змінює енергії електрона і розсіювання можна вважати пружним ($\zeta \ll 1$).

Для дрейфових процесів перенесення носіїв часто вважають, що функція розподілу фононів (2.3) залишається рівноважною, а за $\hbar\omega \ll k_B T$ кількість фононів $N_\phi + 1 \approx N_\phi \approx k_B T / \hbar\omega \gg 1$ пропорційна температурі. Цей факт свідчить, що ймовірності розсіювання з випромінюванням і поглинанням фонуна за цих умов фактично однакові. Тому можна порівняно просто обчислити інтеграл (2.4) з урахуванням (2.7) й отримати вираз для швидкості акустичного розсіювання [3]:

$$\lambda_a = \frac{(2m^*)^{3/2} D_a^2 k_B T}{2\pi \rho v_{зв}^2 \hbar^4} \sqrt{E}, \quad (2.12)$$

де m^* – ефективна маса густини станів; D_a – деформаційний акустичний потенціал; ρ – густина речовини; $v_{зв}$ – швидкість звуку, що відповідає нахилу акустичної гілки поздовжніх коливань за $k_\phi \approx 0$.

Характерно, що час релаксації $\tau = 1/\lambda$ зменшується зі зростанням енергії електрона обернено пропорційно $E^{1/2}$ або його швидкості. У вироджених електронних колективах, наприклад у металах, енергія електронів визначається енергією Фермі й майже не залежить від температури, тому питома електропровідність $\sigma = en\mu$ спадає зі зростанням температури

як $1/T$ через зменшення рухливості $\mu = e\tau/m^*$. У невідроджених напівпровідниках за слабких електричних полів в енергії електрона переважає внесок теплового руху, $E = 3k_B T/2$, і рухливість змінюється пропорційно $T^{-3/2}$.

Оптичне розсіювання. Для оптичних коливань кристалічної ґратки характерний пологий хід закону дисперсії (див. рис. 2.16), тому частоту оптичних фононів ω_0 зазвичай беруть незалежною від хвильового вектора і $\hbar \omega_0 = k_B \theta_D$. Їх енергія за своїм порядком співмірна з тепловою енергією носіїв, тому розсіювання на оптичних фононах вважають *непружним*. Отже, умови розсіювання з випромінюванням фононів і з їх поглинанням суттєво різняться. Як випливає з формули (2.5), поглинання фонона можливе навіть за найнижчих енергій (температур), а для збудження фонона енергія електрона має бути не нижчою за його енергію: $E \geq \hbar \omega_0$. Між тим, пропорційність імовірності розсіювання кількості фононів $(N_\phi + 1/2 \pm 1/2)$ зумовлює відмінності у швидкостях розсіювання: імовірність збудження може бути суттєво більшою за ймовірність поглинання, якщо $N_\phi \ll 1$ (звичайно, якщо енергії електрона достатньо для випромінювання фонона).

Взаємодія з оптичними фононами в атомарних напівпровідниках із суто ковалентними (гомеополярними) зв'язками і в бінарних сполуках з помітною часткою полярних (гетерополярних) зв'язків має різні механізми.

В атомарних напівпровідниках протифазні поздовжні коливання атомів двох підґраток, характерні для оптичної гілки, не приводять до зміни ширини забороненої зони, як при акустичних коливаннях, але змінюють потенціальну енергію взаємодії між сусідніми атомами. За цих умов змінюється й енергія електрона, причому пропорційно зміщенню: $\Delta E = D_0 \Delta x$. Коефіцієнт пропорційності D_0 у цьому випадку має розмірність еВ/см і називається *константою оптичного деформаційного потенціалу*, а саме розсіювання називають розсіюванням на оптичному деформаційному потенціалі або *неполярним оптич-*

ним розсіюванням. Швидкість такого розсіювання [3] розраховують за формулою

$$\lambda_o^{\pm} = \frac{(m^*)^{3/2} D_o^2}{\sqrt{2}\pi\hbar^3 \omega_o} \left(N_{\phi} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \text{Re} \sqrt{E \pm \hbar\omega_o}. \quad (2.13)$$

Тут, як і раніше, верхній знак стосується поглинання фонона, а нижній – його збудження. Оператор Re дає нульову швидкість збудження, якщо $E \leq \hbar\omega_o$, а в разі поглинання фонона він втрачає сенс.

У бінарних напівпровідниках, таких як арсенід галію, зустрічні поздовжні коливання підґраток атомів різної полярності приводять до утворення поляризаційних електричних полів, які спричиняють *полярне оптичне розсіювання*. Його швидкість [3] можна визначити за формулою

$$\lambda_{\text{по}}^{\pm} = \frac{e^2 \sqrt{m^*} \omega_o (N_{\phi} + 1/2 \mp 1/2)}{4\sqrt{2}\pi\epsilon_o \hbar \sqrt{E}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{\text{ст}}} \right) \ln \left| \frac{\sqrt{E} + \text{Re} \sqrt{E \pm \hbar\omega_o}}{\sqrt{E} - \text{Re} \sqrt{E \pm \hbar\omega_o}} \right|. \quad (2.14)$$

Основною особливістю полярного оптичного розсіювання є залежність його швидкості від енергії електрона: $\lambda_{\text{по}} \sim E^{-1/2}$, якщо не брати до уваги відносно повільну логарифмічну залежність у формулі (2.14). Зі збільшенням енергії електрона зменшується ймовірність розсіювання, що сприяє накопиченню енергії та ще меншому її розсіюванню. Така ситуація спостерігається, якщо полярне оптичне розсіювання переважає і приводить до нестійкого процесу, який називають *полярним оптичним униканням* і який викликає інтенсивне розігрівання електронного газу (див. розд. 3).

Міждолинне розсіювання. Результатом міждолинного розсіювання є перехід електрона з однієї долини дисперсійної кривої в іншу. Для атомарних напівпровідників (германій, кремній) він зазвичай відбувається між еквівалентними долинами, наприклад, для кремнію (рис. 2.18, а) з Δ -долини у напрямку [100] також у Δ -долини еквівалентних напрямків [010], [001] тощо. В електричному полі таке розсіювання може привести до перерозподілу заселеності долин електронами, яка в рівноважному стані однакова.

Для бінарних з'єднань $A^{III}B^V$ більш характерним є перехід між нееквівалентними долинами. Наприклад, для GaAs типовим є розсіювання (рис. 2.18, б) із центральної Γ -долини в бокові L-долини, розміщені в напрямках $[111]$, або навіть у X-долини, які лежать ще вище.

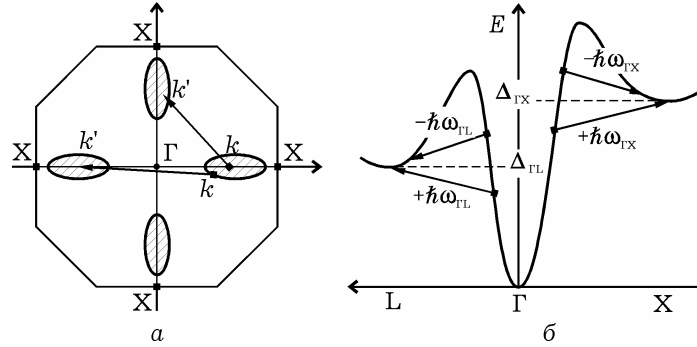


Рис. 2.18. Приклади переходів під час міждолинного розсіювання між еквівалентними долинами у кремнії (а) та між нееквівалентними долинами в арсеніді галію (б)

Практично всі міждолинні переходи супроводжуються змінами хвильового вектора, співмірними з розмірами зони Бріллюена, і тому можливі лише за участі фононів з великими значеннями хвильових векторів. Такі фонони називають *міждолинними*, і відповідають вони ділянкам дисперсійних фононних кривих біля меж зони. Їх енергію переважно вибирають середньою між крайніми значеннями енергій акустичних і оптичних фононів: близько 0,05 eV для Si та майже 0,03 eV для Ge і GaAs (див. рис. 2.16). Ці значення співмірні з тепловою енергією, тому розсіювання з поглинанням чи збудженням міждолинного фонона буде суттєво непружним.

Для переходів між нееквівалентними долинами слід враховувати зміну початку відліку енергії. Якщо електрон розсіюється з i -долини в j -долину, то закон збереження енергії (2.5) набуде вигляду

$$E_j - E_i = \pm \hbar \omega_{ij} - \Delta_{ij}, \quad (2.15)$$

де $\hbar \omega_{ij}$ – енергія міждолинного фонона; Δ_{ij} – міждолинна відстань (з урахуванням знака) від дна j -долини до дна i -долини, $\Delta_{ij} = E_{cj} - E_{ci}$. Відлік значень енергій E_i та E_j починають від мінімумів відповідних долин.

Швидкості міждолинного розсіювання розраховують за формулою, за структурою подібною до (2.13) для неполярного оптичного розсіювання [3]:

$$\lambda_{\text{мд}}^{\pm} = \frac{Z_j (m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{\sqrt{2} \pi \hbar^3 \omega_{ij}} \left(N_{\text{ф}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \text{Re} \sqrt{E_i \pm \hbar \omega_{ij} - \Delta_{ij}}, \quad (2.16)$$

де Z_j – кількість долин, у які може відбутися розсіювання; m_j^* – ефективна маса густини станів у j -долині; D_{ij} – константа міждолинної взаємодії, що має значення $10^8 \dots 10^9$ еВ/см; $N_{\text{ф}}$ – кількість фононів з енергією $\hbar \omega_{ij}$, яку визначають за виразом (2.3). Оператор Re робить неможливим розсіювання за недостатньої енергії електрона. Якщо розсіювання відбувається між еквівалентними долинами, то замість Z_j потрібно підставляти число, на одиницю менше їх кількості, а $\Delta_{ij} = 0$. Для долин, що лежать на межі зони Бріллюена, їх кількість треба зменшити вдвічі.

Кількісне уявлення про інтенсивність різних видів розсіювання можна дістати з рис. 2.19, де зображено залежності швидкостей розсіювання від енергії електронів у Γ - та L-долині арсеніду галію. Слід звернути увагу на пороговий характер кривих для оптичних і міждолинних видів розсіювання, які потребують переходу електрона у вищий енергетичний стан.

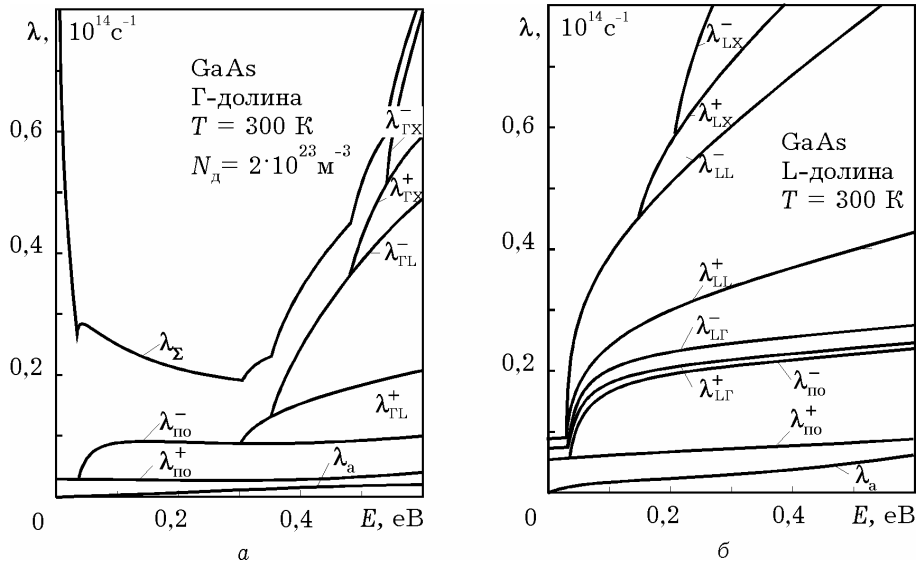


Рис. 2.19. Діаграма залежностей швидкості розсіювання для різних видів від енергії електрона в Γ -долині (а) та L-долині (б). Графік для кожного виду підсумовується з попередніми. Верхня крива λ_{Σ} сумарної швидкості включає також домішкове розсіювання

2.2.2. Домішкове розсіювання

У типових випадках домішки, введені в напівпровідник, є іонізованими, і викликане ними розсіювання означає відхилення траєкторії електрона електростатичним полем іона. Подібну задачу розглядав Резерфорд, коли досліджував розсіювання α -частинок. Електрон у кулонівському полі домішкового іона має гіперболічні траєкторії (рис. 2.20). Оскільки маса іона домішки на 3..4 порядки перевищує масу електрона, то передавання енергії в результаті їх взаємодії майже не відбувається, і таке співударяння можна вважати *пружним*. Відповідно не змінюється значення швидкості, а тільки її напрямок, і $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$. Кут розсіювання θ між векторами \vec{k}' і \vec{k} тим більший, чим менші значення швидкості електрона або дірки і *прицільна відстань* b (рис. 2.20).

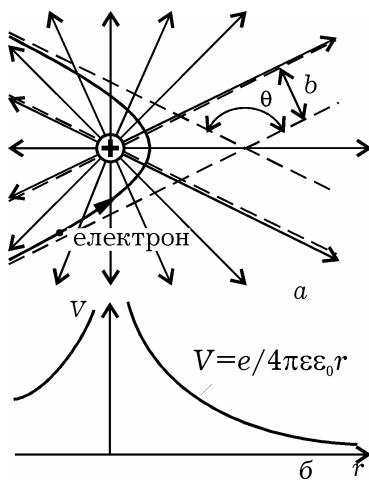


Рис. 2.20. Траєкторія руху електрона у кулонівському полі іона донорної домішки

Для носіїв у твердому тілі модель Резерфорда дає неправильний результат за великих прицільних відстаней: для малих кутів розсіювання інтеграл (2.4) розбігається, що пов'язано з повільністю спадання кулонівського потенціалу. Цей недолік можна усунути, враховуючи поля, створювані іншими іонами домішки і носіями заряду. Їхні поля тією чи іншою мірою екранують поле іона домішки й «обрізають» кулонівський потенціал, послаблюючи його дію насамперед на великих відстанях.

У моделі Конуелл-Вайскопфа [3] область дії поля іона домішки обмежують половиною середньої відстані між іонами (рис. 2.21, а), тому максимальна прицільна відстань

$$b_{\max} = \frac{a}{2} = \frac{1}{2\sqrt[3]{N_d}}. \quad (2.17)$$

Цей вираз впливає з умови, що одному атому домішки в середньому відповідає кубічний об'єм з ребром a . Іноді в літературі можна зустріти дещо інший вираз, який отримано, якщо вважати, що цей елементарний об'єм є сферою з радіусом a . У підсумку врахування обмеження розсіювального поля полями сусідніх атомів домішки дає для швидкості розсіювання

$$\lambda_d = \frac{v}{b_{\max}} \left(\frac{U_i}{2E} \right)^2 \ln \left(1 + \frac{2E}{U_i} \right), \quad (2.18)$$

де E – кінетична, а U_i – потенціальна енергія електрона в полі іона на відстані b_{\max} , $E = m^* v^2 / 2$; $U_i = e^2 / 4\pi\epsilon\epsilon_0 b_{\max}$.

У моделі Брукса–Херрінга далекодія розсіювального поля іона домішки обмежується його екрануванням полями носіїв заряду [3]. При цьому розподіл потенціалу в околі донорного іона (рис. 2.21, б) описують виразом

$$V(r) = \left(\frac{e}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \right) \exp \left(-\frac{r}{r_e} \right), \quad (2.19)$$

де r_e – радіус екранування, $r_e = (\epsilon\epsilon_0 k_B T / e^2 n)^{1/2}$; n – концентрація екранувальних зарядів (електронів), а у формулі (2.18) змінюється останній співмножник:

$$\lambda_d = \frac{v}{b_{\max}} \left(\frac{U_i}{2E} \right)^2 \left[\ln(1 + \eta) - \frac{\eta}{1 + \eta} \right], \quad (2.20)$$

де $\eta = (2kr_e)^2$, а для квадратичного закону дисперсії, коли $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, $\eta = 8m^* E r_e^2 / \hbar^2$.

Слід зазначити, що вираз (2.19) придатний для максвеллівського розподілу. Але іноді його використовують, якщо середня енергія хаотичного руху електронів помітно перевищує величину $k_B T$, підставляючи у вираз для радіуса екранування *електронну температуру* T_e .

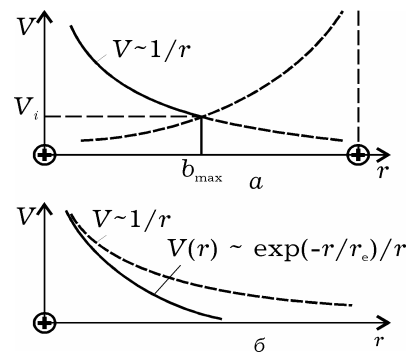


Рис. 2.21. Обмеження потенціальної функції іона домішки у разі екранування розсіювального поля: сусідніми іонами домішки за моделлю Конуелл–Вайскопфа (а); рухливими носіями заряду за моделлю Брукса–Херрінга (б)

Обидві моделі підтверджують відомий результат про температурну залежність рухливості. Якщо вважати, що енергія носіїв відповідає тепловій ($E \sim k_B T$, $v \sim T^{1/2}$), і знехтувати повільною логарифмічною залежністю у формулі (2.18), то отримаємо, що швидкість домішкового розсіювання пропорційна концентрації домішки N_d й обернено пропорційна $T^{3/2}$. Модель Конуелл-Вайскопфа за дуже низьких температур дає значно завищений результат (формально $\lambda \rightarrow \infty$ за $T \rightarrow 0$), якщо не враховувати ефекти виморожування домішки.

Серед інших видів розсіювання, які можуть відігравати помітну роль за певних умов, слід назвати *електрон-електронне розсіювання*, яке відбувається за високих концентрацій домішки. Під час міжелектронної взаємодії повний імпульс і енергія колективу залишаються незмінними, лише перерозподіляючись між частинками, хаотизуючи їх рух та згладжуючи функцію розподілу.

Останнім часом широко використовують три- та чотирикомпонентні напівпровідникові матеріали, наприклад $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$. Їх можна розглядати як сплави бінарних сполук $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, у яких навіть за ідеальної будови кристалічної ґратки розміщення різних атомів однієї групи має випадковий характер. У таких сполуках може бути суттєвим *розсіювання на сплавному потенціалі*, викликане хаотичними відхиленнями потенціалу кристалічної ґратки від ідеальної періодичної функції. Значення сплавного потенціалу залежить від різниці енергій електронного споріднення бінарних компонентів і пропорційне добутку їх концентрацій.

З позицій теорії розсіювання можна розглядати й ті взаємодії, що викликають міжзонні переходи: генерацію носіїв під дією світла, співударянь, сильних електричних полів тощо, та їх рекомбінацію з випромінюванням квантів світла, фононів. Однак час релаксації для цих процесів зазвичай на декілька порядків більший, ніж для внутрізонних, тому генераційно-рекомбінаційні явища відносять до повільних і розглядають окремо.

2.3. СЕРЕДНІ ЧАСИ РЕЛАКСАЦІЇ

2.3.1. Часи релаксації імпульсу

Розглянуті в попередніх розділах вирази для швидкостей різних механізмів розсіювання характеризують частоти тих чи інших видів зіткнень як *одиничних актів* за відомих параметрів носіїв. Часи релаксації концентрації, імпульсу та енергії визначають швидкості перехідних процесів у колективі й за своєю суттю є характеристиками, *усередненими* за всією сукупністю параметрів носіїв, тобто за функцією їх розподілу. Отримання аналітичних співвідношень ускладнюється із використанням під час інтегрування розподілу Фермі–Дірака, тому для усереднення найчастіше беруть функцію розподілу Максвелла–Больцмана, в якій для врахування нерівноважності колективу замість температури ґратки T використано електронну температуру T_e . Перенесемо громіздкі процедури інтегрування у дод. Д2, тут наведемо лише кінцеві результати для часів релаксації.

Домішкове розсіювання, як уже зазначалося, є пружним і, не змінюючи загальної енергії носіїв, не бере участі в міждолинних переходах та релаксації енергії. Водночас, ефективно хаотизуючи рух носіїв, воно дає помітний (особливо за низьких температур, коли роль фононів незначна) внесок у релаксацію імпульсу.

Середній час релаксації імпульсу знаходять з інтеграла (1.46), у якому швидкість розсіювання λ_d відповідно до виразів (2.19) і (2.20) беруть пропорційною $E^{-3/2}$, а співмножники у квадратних дужках вважають сталими. На основі співвідношення $N(k)dk = N(E)dE$ у разі квадратичного закону дисперсії відбувається перехід від інтегрування за k -простором до інтегрування за енергією. Вибираючи функцію розподілу $N(E) = g(E)f(E)$ максвеллівською ($f(E) = \exp[(E_\phi - E)/k_B T_e]$) і границі інтегрування від $E = 0$ (дно зони) до ∞ , отримаємо для часу релаксації імпульсу

$$\frac{1}{\tau_{p d}} = \sqrt{\frac{8\pi}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right)^2 \left[\ln(1 + \eta) - \frac{\eta}{1 + \eta} \right] N_d (k_B T_e)^{-3/2} \quad (2.21)$$

із припущенням, що імпульс у лівій частині інтеграла (1.46), а також величину η у виразах (2.19) і (2.20) визначають для середньої енергії теплового руху, тобто $p = \sqrt{3m^*k_B T_e}$, і для моделі Брукса–Херрінга

$$\eta = (2kr_e)^2 = \frac{12\varepsilon\varepsilon_0 m^* (k_B T_e)^2}{\hbar^2 e^2 N_d}. \quad (2.22)$$

У разі використання моделі Конуелл–Вайскопфа, яка не враховує екранування домішкового центру носіями, значення η задають виразом

$$\eta = \frac{6\pi\varepsilon\varepsilon_0 k_B T_e}{e^2 N_d^{1/3}}, \quad (2.23)$$

а у виразі (2.21) опускають другий доданок у квадратних дужках.

Вираз (2.21) правильно описує експериментальну залежність рухливості від температури, якщо домішкове розсіювання переважає. Для більш точного збігу з експериментом у виразі (2.21) можна використати поправковий коефіцієнт (див. дод. Д2), що залежить як від способу усереднення, так і від форми об'єму, який у середньому припадає на один атом домішки.

Для **акустичного розсіювання** характерна лінійна залежність швидкості розсіювання від температури кристалічної ґратки T , що пояснюється зменшенням довжини вільного пробігу зі збільшенням кількості фононів, а також від швидкості носіїв пропорційно $E^{1/2}$. У цьому разі процедура усереднення не викликає особливих труднощів (див. дод. Д2). Якщо вибрати функцію розподілу максвеллівською: $f(E) \sim \exp(-E/k_B T_e)$, то обернений час релаксації імпульсу збігатиметься зі швидкістю акустичного розсіювання (2.12), якщо замінити $E = 3k_B T_e/2$:

$$\frac{1}{\tau_{\text{пак}}} = \frac{\sqrt{3} m^{*3/2} D_a^2}{\pi \hbar^4 \rho v_{\text{зв}}^2} k_B T \sqrt{k_B T_e}. \quad (2.24)$$

Інші варіанти усереднення, наведені у додатку, дають результати, що відрізняються від останнього виразу значенням коефіцієнта пропорційності, близьким до одиниці.

Оптичне розсіювання є непружним, після кожної такої взаємодії енергія електрона змінюється на величину $\pm\hbar\omega_0$. Оскільки ця величина оптичного фонона може бути співмірною з енергією носіїв, то швидкості розсіювання з поглинанням фонона і з його збудженням можуть помітно різнитися. Усереднивши швидкості розсіювання у формулі (2.13) на оптичному деформаційному потенціалі за функцією розподілу Максвелла–Больцмана з електронною температурою T_e , для часу релаксації імпульсу отримаємо вираз (див. формулу (Д2.18))

$$\frac{1}{\tau_{po}^{\pm}} = \left(\frac{m^*}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{D_o^2}{\rho \hbar^2} \frac{e^{\mp(t-t_e)}}{(k_B T_e)^{1/2} \text{sh } t} K_1(t_e), \quad (2.25)$$

де позначено $t = \hbar\omega_0/2k_B T$; $t_e = \hbar\omega_0/2k_B T_e$; K_1 – модифікована функція Бесселя першого порядку.

Загальний час релаксації імпульсу знаходять через суму обернених часів для поглинання і збудження:

$$\frac{1}{\tau_{po}} = \frac{1}{\tau_{po}^+} + \frac{1}{\tau_{po}^-} = 2 \left(\frac{m^*}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{D_o^2}{\rho \hbar^2} \frac{\text{ch}(t - t_e)}{(k_B T_e)^{1/2} \text{sh } t} K_1(t_e). \quad (2.26)$$

У наближенні «теплих» електронів $T_e \approx T$, тому $\text{ch}(t - t_e) \approx 1$.

Для **полярного оптичного розсіювання** усереднення швидкості розсіювання у формулі (2.14) за розподілом Максвелла–Больцмана з температурою T_e дає подібні результати (див. дод. Д2), які відрізняються лише значенням коефіцієнта пропорційності й на одиницю меншим порядком функції Бесселя: для обернених часів із поглинанням і збудженням

$$\frac{1}{\tau_{po}^{\pm}} = \frac{\alpha \omega_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{t_e^{1/2}}{\text{sh } t} \exp[\mp(t - t_e)] K_0(t_e), \quad (2.27)$$

і для сумарного часу

$$\frac{1}{\tau_{po}} = \alpha \omega_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\text{ch}(t - t_e)}{\text{sh } t} t_e^{1/2} K_0(t_e). \quad (2.28)$$

У цьому разі для «теплих» електронів ($T_e \approx T$) $\text{ch}(t - t_e) \approx 1$ і

$$\frac{1}{\tau_{po}} = \alpha \omega_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{t_e^{1/2}}{\text{sh } t} K_0(t_e). \quad (2.29)$$

В останніх виразах уведено *полярну константу*:

$$\alpha = \frac{e^2 \sqrt{m^*}}{4\sqrt{2} \pi \varepsilon_0 \hbar (\hbar \omega_0)^{1/2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_{\text{ст}}} \right). \quad (2.30)$$

Міждолинне розсіювання також є непружним, оскільки в кожному його акті поглинається або збуджується *міждолинний фонон* з енергією $\hbar \omega_{ij}$, близькою до енергії оптичних фононів. Для міждолинного розсіювання, на відміну від інших механізмів, кінетичне рівняння усереднюють не за всією зоною Бріллюена, а за характерними станами, які відповідають окремим долинам. Тому навіть у разі збереження загальної концентрації частинок у всій зоні вона може перерозподілятися між окремими долинами. Відповідно, інерційність цього процесу визначається концентраційним часом релаксації τ_n , який знаходять, як і час релаксації імпульсу τ_p (див. дод. Д2), усередненням швидкості міждолинного розсіювання (2.16) за функцією розподілу. Використавши для цього максвеллівську функцію з електронною температурою T_e , отримаємо для часу релаксації τ_{ij}^\pm з поглинанням (верхній знак) і збудженням (нижній) міждолинного фонона $\hbar \omega_{ij}$ для переходів електронів з i -долини в j -долину:

$$\frac{1}{\tau_{pij}^\pm} = \left(\frac{m_j^*}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{Z_j D_{ij}^2}{\rho \hbar^3 \omega_{ij}} \frac{e^{-\delta_{ij}/2}}{\text{sh } t} |\delta_{ij}| \sqrt{k_B T_e} e^{\mp(t-t_e)} K_1 \left(\frac{|\delta_{ij}|}{2} \right), \quad (2.31)$$

де δ_{ij} – нормована відстань від дна j -долини до дна i -долини, $\delta_{ij} = \Delta_{ij}/k_B T_e = (E_{cj} - E_{ci})/k_B T_e$. Із переходом електрона з нижньої долини у верхню $\delta_{ij} > 0$, величини t і t_e визначають, як і для оптичного розсіювання, але у вирази для їх обчислення треба підставити енергію міждолинного фонона. Додавши обернені часи релаксації з поглинанням та збудженням фононів, отримаємо значення обернених часів релаксації концентрації та імпульсу:

$$\frac{1}{\tau_{nij}} = \frac{1}{\tau_{pij}} = \left(\frac{m_j^*}{2\pi} \right)^3 \frac{2Z_j D_{ij}^2}{\rho \hbar^3 \omega_{ij}} \frac{|\delta_{ij}| e^{-\frac{\delta_{ij}}{2}}}{\text{sh } t} \text{ch}(t - t_e) \sqrt{k_B T_e} K_1 \left(\frac{|\delta_{ij}|}{2} \right). \quad (2.32)$$

Використовуючи співвідношення (2.31) і (2.32), слід звернути увагу, що, по-перше, якщо у ці співвідношення входить ефективна маса густини станів, яка зазвичай враховує кількість долин, тоді величину Z_j треба вилучити. По-друге, вирази (2.31) і (2.32) отримано з припущення, що енергія міждолинного фонона значно менша за міждолинну відстань ($\hbar\omega_{ij} \ll \Delta_{ij}$). Це цілком виправдано для більшості практично важливих випадків, коли міждолинна відстань помітно перевищує величину $k_B T$. Наприклад, для GaAs енергія міждолинних фононів близька до 0,03 еВ, а відстань між найближчими долинами $\Delta_{GL} \approx 0,3$ еВ. Більш загальні вирази наведено в додатку.

Отримані результати придатні для аналізу розсіювання між нееквівалентними долинами. Щоб проаналізувати розсіювання між еквівалентними долинами ($\Delta_{ij} = 0$), можна використати вирази для швидкості розсіювання (2.13) для неполярного оптичного розсіювання з відповідною заміною позначень.

2.3.2. Часи релаксації енергії, пружність розсіювання

Взаємодія електрона з домішковими атомами фактично повністю пружна і не викликає релаксації енергії, тому вважають, що для домішкового розсіювання $1/\tau_{Ed} = 0$.

Щоб визначити час релаксації енергії для фононних видів розсіювання, можна скористатися співвідношенням (1.42), в якому, щоб уникнути громіздких процедур усереднення за функцією розподілу, зручно використати вираз для середньої швидкості втрат енергії одного електрона за рахунок зіткнень у такій простій формі:

$$\left(\frac{dE}{dt} \right)_c = \frac{\hbar\omega_\phi}{\tau_{p\phi}^+} - \frac{\hbar\omega_\phi}{\tau_{p\phi}^-}. \quad (2.33)$$

Зміст цього співвідношення такий: оскільки $1/\tau_p$ – середня кількість зіткнень за 1 с, а після кожного зіткнення енергія електрона змінюється на величину, рівну енергії фонона $\hbar\omega_\phi$, то перший доданок відповідає середній енергії, набутій електроном

за 1 с за рахунок поглинання фононів, а другий – енергії, втраченій з їх збудженням. Прирівнявши вираз (2.33) до правої частини співвідношення (1.42), отримаємо вираз

$$\frac{1}{\tau_E} = \frac{\hbar\omega_\phi(1/\tau_{p\phi}^+ - 1/\tau_{p\phi}^-)}{E - E_0}, \quad (2.34)$$

який використовують для визначення часу релаксації енергії за знайденим раніше часом релаксації імпульсу із збудженням та поглинанням фононів.

Однак у більшості розрахунків зручніше користуватися не часом τ_E , а відношенням τ_E/τ_p , яке має простий фізичний зміст. Спочатку зазначимо, що розсіювання зі збудженням фононів зазвичай переважає розсіювання з їх поглинанням, тому $1/\tau_{p\phi}^+ > 1/\tau_{p\phi}^-$ і в чисельнику виразу (2.34) стоїть середня енергія, що під час фононного розсіювання передається електроном кристалічній ґратці за 1 с, а в знаменнику – надлишкова середня енергія електрона, яку він може віддати у процесі релаксації. Домноживши вираз (2.34) на τ_p , отримаємо співвідношення

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{\hbar\omega_\phi}{E - E_0} \frac{1/\tau_{p\phi}^+ - 1/\tau_{p\phi}^-}{1/\tau_{p\phi}^+ + 1/\tau_{p\phi}^-}, \quad (2.35)$$

що характеризує середню частину енергії, яку втрачає електрон за час τ_p , тобто за одне зіткнення. За структурою та змістом воно відповідає виразу (2.9), який характеризує ступінь пружності співударянь як одиничних актів і який включає ймовірності переходів $w_{kk'}^+$ та $w_{kk'}^-$, що різняться тільки кількістю фононів, які беруть участь у розсіюванні з їх поглинанням і збудженням. Ця відмінність для $w_{kk'}^\pm$ визначається множителем $(N_\phi + 1/2 \pm 1/2) = e^{\pm t}/2\text{sht}$, де $t = \hbar\omega_\phi/2k_B T$. У виразі (2.35) замість $w_{kk'}^\pm$ стоять обернені часи релаксації $1/\tau_{p\phi}^\pm$, які, як видно з виразів (2.25) і (2.27), за умови розігрівання електронів для оптичних видів розсіювання різняться ще й знаком у множ-

нику $\exp(\pm t_e)$, що включає електронну температуру через параметр $t_e = \hbar\omega_{\phi}/2k_B T_e$. Тому другий співмножник у виразі (2.35), на відміну від рівняння (2.9), дорівнюватиме $\text{th}(t - t_e)$, а саме співвідношення набуде вигляду

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{4}{3} \frac{t t_e}{t - t_e} \text{th}(t - t_e). \quad (2.36)$$

Для міждолинного розсіювання, коли енергія електрона змінюється не лише на значення енергії фонона, але й на значення міждолинної відстані $\pm\Delta_{ij}$, аргументом функції Бесселя у співвідношенні (2.31) є параметр $|\delta_{ij}/2 \pm t_e|$ (див. дод. Д2) і вираз для τ_p/τ_E буде більш складним. Однак для найтипівіших випадків, коли $\hbar\omega_{ij} \ll \Delta_{ij}$, для $1/\tau_{ij}^{\pm}$ наближено справджується співвідношення (2.31) і відношення τ_p/τ_E , тобто пружність міждолинного розсіювання також можна визначати за співвідношенням (2.36).

Цей вираз можна спростити для двох типових випадків: для «теплих» електронів, коли $T_e \approx T$, $t_e \approx t$ та $\text{th}x \approx x$:

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} \approx \frac{4t t_e}{3}, \quad (2.37)$$

і для «гарячих» ($T_e \gg T$, $t_e \ll t$):

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} \approx \frac{4t_e \text{th}t}{3}. \quad (2.38)$$

Важливою властивістю відношення часів релаксації імпульсу та енергії є лінійна залежність його від оберненої електронної температури, що визначає специфіку перебігу деяких фізичних процесів у сильних електричних полях (див. розд. 3). Однак це характерно тільки для оптичних і міждолинних фононів, енергію яких через вузькість їх спектра беруть сталою.

За участі в розсіюванні акустичних фононів спостерігається дещо інша ситуація. По-перше, через їх малу енергію і, відповідно, високу пружність такого розсіювання іноді нехтують акустичним механізмом релаксації енергії. Але за браком оптичного розсіювання саме акустичний механізм забезпечує

передавання енергії від електронів до кристалічної ґратки, встановлюючи термодинамічну рівновагу. По-друге, пружність акустичного розсіювання майже не залежить від електронної температури, адже з її зростанням зростає й енергія фононів, що беруть участь у розсіюванні. Ця особливість пов'язана з тим, що спектр акустичних коливань достатньо широкий і, як зазначалось у п. 2.2.1, у розсіюванні беруть участь низькочастотні фонони, їх хвильовий вектор лежить у межах $|k_{\text{ф}}| \leq 2|k|$. Для квадратичного закону дисперсії електронів $k = \sqrt{2m^*E/\hbar^2}$ і, відповідно, $|k_{\text{ф}}| \leq 2\sqrt{2m^*E/\hbar^2}$. На малих частотах фононний закон дисперсії (2.1) можна вважати лінійним, тобто $\omega_{\text{ф}} = v_{\text{зв}}|k_{\text{ф}}|$, тому енергія таких фононів $\hbar\omega_{\text{ф}} \leq v_{\text{зв}}(8m^*E)^{1/2}$. Якщо вважати, що в розсіюванні беруть участь електрони з середньою енергією $E = 3k_{\text{Б}}T_e/2$, то для акустичних фононів t_e і $t \ll 1$, і вираз (2.37) для коефіцієнта пружності набуде вигляду

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{4m^*v_{\text{зв}}^2}{k_{\text{Б}}T}. \quad (2.39)$$

Отже, на відміну від оптичних механізмів, пружність акустичного розсіювання не залежить від електронної температури. Підставивши типові значення ($m^* \approx 0,1m$; $v_{\text{зв}} \approx 10^3$ м/с; $T = 300$ К), побачимо, що відношення τ_E/τ_p , яке наближено характеризує кількість необхідних для релаксації енергії зіткнень, має порядок $10^2 \dots 10^3$.

Релаксація розподілу імпульсу відбувається фактично за одне зіткнення, тобто за час порядку τ_p . За цих умов рівновага між ґраткою та електронами встановлюється за рахунок підвищення T_e (див. розд. 3). Так, в електричному полі з напруженістю порядку 10^3 В/м за кімнатної температури $T_e \approx 350$ К, а в сильніших полях це перевищення може бути багатократним. Водночас для оптичного розсіювання за $T_e = 350$ К, $T = 300$ К, $\hbar\omega_0 = 0,03$ еВ, отримаємо час релаксації $\tau_{E0} = 2,5\tau_{p0}$, що поясню-

ється більшою непружністю такого розсіювання порівняно з акустичним.

Відмінність у часі релаксації імпульсу та енергії визначає деякі особливості перехідних процесів під час вмикання та вимикання електричного поля. Розв'язуючи рівняння збереження імпульсу (1.57) у припущенні постійного часу релаксації можна отримати, що із вмиканням електричного поля у момент часу t_0^+ (рис. 2.22, а) відбувається поступовий перехід електронного колективу з рівноважного стану ($v(t_0^+) = 0$) у стаціонарний ($v(\infty) = \mu\mathcal{E}$) за законом

$$v(t) = \mu\mathcal{E} \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{(t - t_0^+)}{\tau_p} \right] \right\}. \quad (2.40)$$

Після вимкнення поля ($\mathcal{E} = 0$) у момент t_0^- відбувається релаксація зі стаціонарного стану, яка відповідно до розв'язку рівняння (1.57) описується функцією

$$v(t) = \mu\mathcal{E} \exp \left[-\frac{(t - t_0^-)}{\tau_p} \right]. \quad (2.41)$$

Вона показує (рис. 2.22, б), що після вимикання поля відбувається повернення в рівноважний стан. Інерційність цих перехідних процесів визначається часом релаксації імпульсу τ_p , який за значенням збігається з часом τ , що входить у кінетичне рівняння.

Інша ситуація спостерігається для енергії. Розв'язком рівняння (1.60) у разі вмикання поля буде функція

$$E(t) = E_0 + e\tau_E\mu\mathcal{E}^2 \left[1 - \frac{\tau_E}{\tau_E - \tau_p} e^{-(t-t_0^+)/\tau_E} + \frac{\tau_p}{\tau_E - \tau_p} e^{-(t-t_0^+)/\tau_p} \right], \quad (2.42)$$

а у разі вимикання

$$E(t) = E_0 + e\tau_E\mu\mathcal{E}^2 \exp \left[-\frac{(t - t_0^-)}{\tau_E} \right]. \quad (2.43)$$

Характерна особливість цих функцій (рис. 2.22, в) полягає в тому, що тривалість перехідних процесів визначається в

основному часом τ_E , більшим за τ_p . Деякий вплив релаксаційного процесу з часовою константою τ_p помітний після вмикання поля і проявляється у повільнішому зростанні енергії на початку. Це відображає третій доданок у дужках функції (2.42), внесок якого зменшується із підсиленням нерівності $\tau_E > \tau_p$. Після вимикання поля релаксація енергії до рівноважного значення E_0 відбувається за експоненціальним законом (2.43) з характерною часовою константою τ_E .

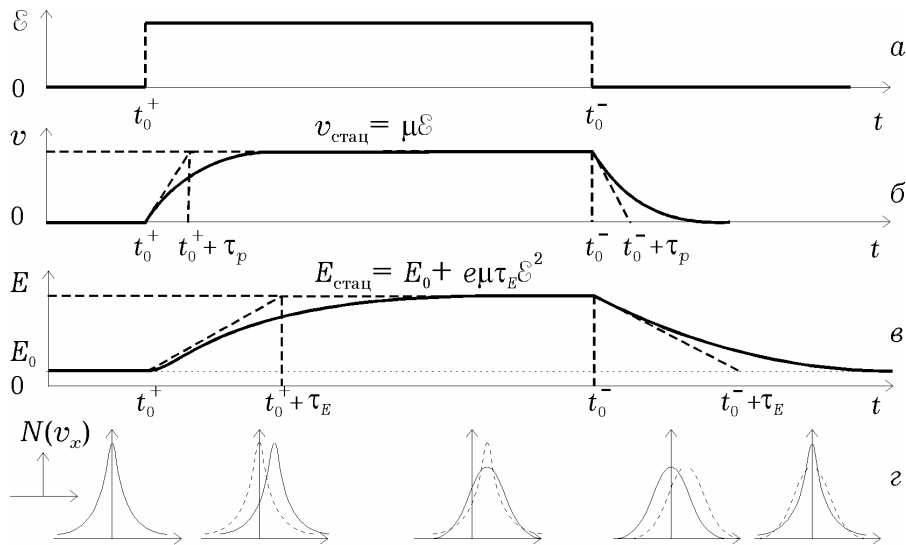


Рис. 2.22. Часові діаграми перехідних процесів під час вмикання та вимикання електричного поля (а). Встановлення стаціонарного стану із вмиканням і релаксація після вимикання для швидкості (б) та енергії (в) відбувається із суттєво різними швидкостями. Унизу (г) наведено символічне зображення функції розподілу для відповідних моментів часу

Результат таких перехідних процесів – еволюцію функції розподілу $N(v_x)$, схематично зображено на рис. 2.22, г. Із вмиканням поля вона за час порядку τ_p з рівноважного стану зміщується так, що середнє значення стаціонарної швидкості встановлюється рівним швидкості дрейфу $v = \mu\mathcal{E}$. Але повністю стаціонарною функція стає лише за час $\tau_E > \tau_p$, коли відбувається її розширення, яке означає збільшення середньої енергії електрона. Після вимикання поля швидше відбувається релаксація дрейфової швидкості до нульового значення і функція стає симетричною, залишаючись широкою. І лише через час порядку τ_E вона звужується, що означає зменшення енергії до

рівноважного значення E_0 і повернення електронного колективу в рівноважний стан.

2.4. РУХЛИВІСТЬ ЕЛЕКТРОНІВ

Результати теорії розсіювання найчастіше застосовують, мабуть, для розрахунку рухливості. Саме особливості різних механізмів розсіювання та деталей зонної структури визначають характерні електричні властивості тих чи інших напівпровідників та динаміку електронних процесів.

Нагадаємо, що рухливість $\mu = e\tau_p/m_c^*$ визначається середнім часом релаксації імпульсу τ_p та омічною ефективною масою m_c^* . Середній час релаксації імпульсу найчастіше знаходять через суму обернених часів релаксації для окремих механізмів розсіювання, хоча точність цього правила, яке ґрунтується на принципі незалежності одне від одного різних видів зіткнень, іноді піддають сумніву. Питома вага певного виду розсіювання визначає вплив зовнішніх чинників на рухливість. Отже, розглянемо спочатку рухливість у слабких електричних полях, коли температура електронного газу T_e дорівнює температурі кристалічної ґратки T .

Кремній. З фононних механізмів для кремнію характерні акустичне та неполярне оптичне розсіювання. Акустичне розсіювання, строго кажучи, є анізотропним, оскільки електрони взаємодіють як з поздовжніми, так і з поперечними коливаннями кристалічної ґратки, але переважає взаємодія з поздовжніми коливаннями. Тому для розрахунку часів релаксації у разі акустичного розсіювання можна з достатньою точністю використовувати вирази (2.24) і (2.39), отримані в ізотропному наближенні, але із швидкістю поширення поздовжніх коливань $v_{зв} = v_l = 9,0 \cdot 10^3$ м/с і відповідним деформаційним потенціалом $D_a = 6$ еВ. Діелектрична проникність і густина речовини відповідно $\epsilon = 11,9$ і $\rho = 2,33$ г/см³. Слід також мати на увазі, що у виразі (2.24) необхідно використовувати значення ефективної

маси густини станів, яку визначають через компоненти тензора ефективної маси ($m_l^* = 0,98m$; $m_t^* = 0,19m$) з урахуванням кількості еквівалентних долин ($M = 6$), що відповідають дну зони провідності кремнію: $m_d^* = 6^{2/3}(m_t^{*2}m_l^*)^{1/3} = 1,08m$. У виразі (2.39) для розрахунку часу релаксації енергії треба використовувати омічну ефективну масу $m_c^* = 3m_t^*m_l^*/(2m_l^* + m_t^*) = 0,26m$.

Оптичне розсіювання в кремнії є неполярним і відбувається на оптичному деформаційному потенціалі. За наявності різних долин таке розсіювання розглядають фактично як еквівалентне міждолинне. Оскільки нижні долини кремнію розміщені в зоні Бріллюена в точках Δ , яким відповідає значення $k = 0,85(2\pi/a)$, то можливі два типи переходів (рис. 2.23).

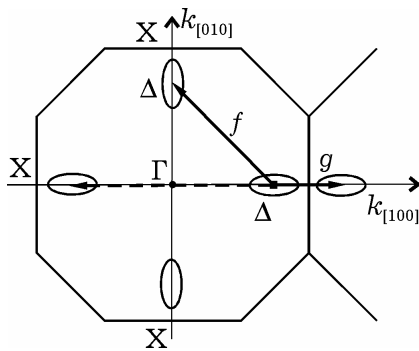


Рис. 2.23. Види переходів під час оптичного розсіювання в кремнії: f – переходи між перпендикулярними долинами; g – переходи між співвісними долинами (штрихова лінія), які зручніше розглядати як переходи в сусідню зону Бріллюена

Переходи між співвісними долинами (штрихова лінія) з урахуванням періодичності закону дисперсії зручніше розглядати як g -переходи (суцільна лінія) у сусідню зону Бріллюена зі зміною хвильового вектора на $\Delta k = 0,29(2\pi/a)$. Якщо звернутися до дисперсійної кривої фононів для цього напрямку (див. рис. 2.16) і врахувати, що взаємодіяти електрон може тільки з поздовжніми оптичними коливаннями, то очевидно, що таку зміну хвильового вектора електрона можуть забезпечити фонони з енергією $\hbar\omega_{01} \approx 0,062$ еВ.

Інший можливий тип розсіювання викликає f -переходи (рис. 2.23) між долинами, що лежать на перпендикулярних осях. Розглянувши відповідні фононні дисперсійні криві (на рис. 2.16 їх не наведено) побачимо, що такі переходи можуть відбуватися за участю двох типів фононів з енергіями $\hbar\omega_{02} \approx 0,059$ еВ і $\hbar\omega_{03} \approx 0,047$ еВ. Цим трьом видам розсіювання відповідають

оптичні деформаційні потенціали: $D_{o1} = 7,5 \cdot 10^8$ еВ/см, $D_{o2} = 2,0 \cdot 10^8$ еВ/см та $D_{o3} = 4,3 \cdot 10^8$ еВ/см [3]. Для спрощення розрахунків без великої втрати точності всі три види розсіювання можна розглядати як один із деякими усередненими еквівалентними параметрами, наприклад $\hbar\omega_o = 0,05$ еВ та $D_o = 5,5 \cdot 10^8$ еВ/см. В ефективну масу густини станів при цьому не включають кількості долин $m_{d1}^* = (m_t^{*2} m_l^*)^{1/3}$, але час релаксації домножують на кількість долин, у які відбувається розсіювання, тобто на п'ять.

Слід також мати на увазі, що оптичні розсіювання відбуваються переважно зі збудженням фонона, тому для розрахунку часу релаксації можна використовувати вираз (2.25) для $1/\tau_{po}^-$, а для швидкості втрат енергії – другий доданок виразу (2.33) для збудження фонона. Щодо оптичного розсіювання, то поняття часу релаксації енергії, строго кажучи, визначити неможливо, бо в цьому випадку швидкість втрат енергії електрона не пропорційна відхиленню його енергії від рівноважного значення. Але для оцінювання можна використовувати співвідношення (2.33).

Для аналізу домішкового розсіювання придатний вираз (2.21). Основною проблемою при цьому є вибір того чи іншого наближення. Нагадаємо, що в моделі Брукса–Херрінга фактором, що обмежує далекодію поля іона домішки, вважається екранування кулонівського поля рухливими носіями заряду. У моделі Конуелл–Вайскопфа таким фактором є наявність сусідніх домішкових атомів. Певним критерієм для вибору тієї чи іншої моделі може служити співвідношення між середньою міждомішковою відстанню та радіусом екранування. Так, якщо концентрація домішки $N_d = 10^{21}$ м⁻³ і температура $T = 300$ К, то радіус екранування $r_e = 0,13$ мкм, а максимальна прицільна відстань $b_m = 0,05$ мкм. Із співвідношення $b_m < r_e$ видно, що сильнішим фактором є обмеження розсіювання сусідніми іонами домішки, а більш придатною – модель Конуелл–Вайскопфа.

Наближення Брукса–Херрінга обґрунтоване у випадку суттєвого зростання ролі екранування рухливими носіями, що спостерігається із підвищенням концентрації домішки і (або) за низьких температур, коли

$$k_B T < \frac{e^2 N_d^{1/3}}{4\epsilon\epsilon_0}. \quad (2.44)$$

За низьких температур слід також враховувати «виморожування» домішки.

Результати розрахунків часів релаксації, які пояснюють внесок різних механізмів розсіювання у підсумкове значення рухливості, зображено на рис. 2.24, а. Крім області низьких температур, переважає розсіювання імпульсу на фононах.

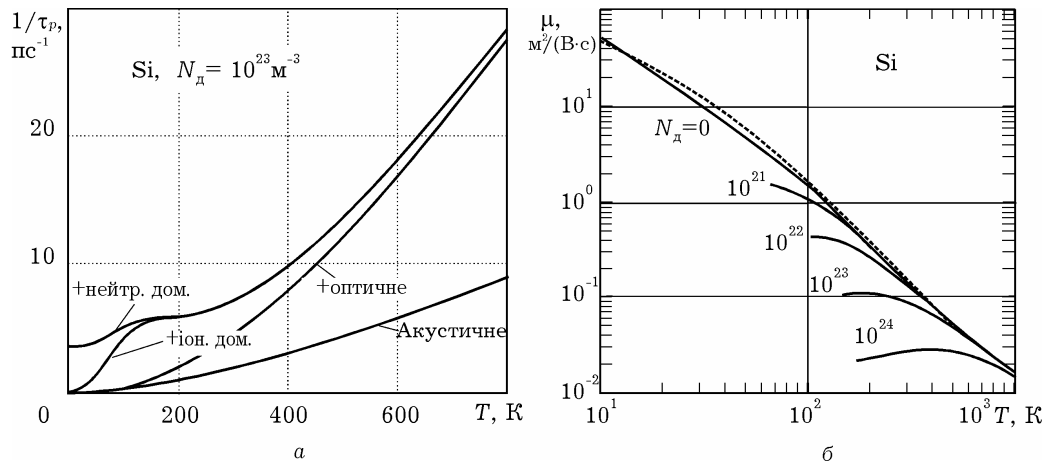


Рис. 2.24. Температурні залежності обернених часів релаксації імпульсу за фіксованої концентрації домішки (а) та рухливості за різних концентрацій домішки (б) для кремнію (штрихова лінія – експериментальна)

Вплив оптичних фононів виявляється лише з підвищенням температури до близько 100 К. За низьких температур зростає роль домішкового розсіювання, причому за найнижчих температур – на нейтральних домішкових атомах.

Підсумком такого аналізу є залежності рухливості від температури (рис. 2.24, б) за різних концентрацій домішки. У логарифмічних координатах температурна залежність рухливості для найнижчих температур спрямлюється (якщо немає домішки) і її нахил відповідає степеневій залежності $T^{-3/2}$, характерній для акустичного розсіювання. Із підвищенням температури ця

лінійність зникає, що означає переважання оптичного розсіювання. На найкрутішій ділянці (за температури близько 200 К) нахил відповідає залежності $\mu \sim T^{-2,4}$, яка добре узгоджується з експериментальною залежністю, зображеною на тому самому рисунку і взятою з роботи [50].

Наявність домішки знижує рухливість тим більше, чим вища її концентрація. Це сильніше виявляється зі зниженням температури, коли фононні механізми розсіювання слабшають. Помітне відхилення від експериментальних значень (рис. 2.25) спостерігається лише для великих концентрацій домішки, коли починається виродження електронного газу, яке не враховане в наведених розрахунках.

Германій. Для германію характерні ті самі механізми розсіювання, що й для кремнію. Акустичне розсіювання тут також переважає в області низьких температур (якщо немає домішки). Для розрахунку часу акустичної релаксації було використано значення акустичного деформаційного потенціалу $D_a = 8$ еВ, швидкості звуку $v_{зв} = 5,4 \cdot 10^3$ м/с, густини $\rho = 5,3$ г/см³, діелектричної проникності $\epsilon = 16,0$ та ефективної маси густини станів $m_d^* = 0,56m$.

Оптичне розсіювання відбувається на оптичному деформаційному потенціалі й зумовлює переходи електронів в еквівалентні долини. Основна відмінність від кремнію пов'язана з особливістю закону дисперсії. Як відомо, дно зони провідності для германію міститься в Λ -напрямку на межі зони Бріллюена в точках L (рис. 2.5). Це відповідає наявності восьми половин або чотирьох повних еквівалентних долин із сильною анізотропією ефективної маси $m_t^*/m_l^* = 0,08/1,58$. При цьому, як і в кремнії, можливі різні типи електронних переходів між долинами, але в середньому їх можна змодельовати як одне міждолинне еквівалентне розсіювання на оптичному деформаційному потенціалі для $D_o = 5,5 \cdot 10^8$ еВ/см за участі оптичних фононів з енергією $\hbar\omega_o = 0,034$ еВ. Для аналізу домішкового розсіювання тут так само, як і в кремнії, перевагу має модель Конуелл–Вайскопфа.

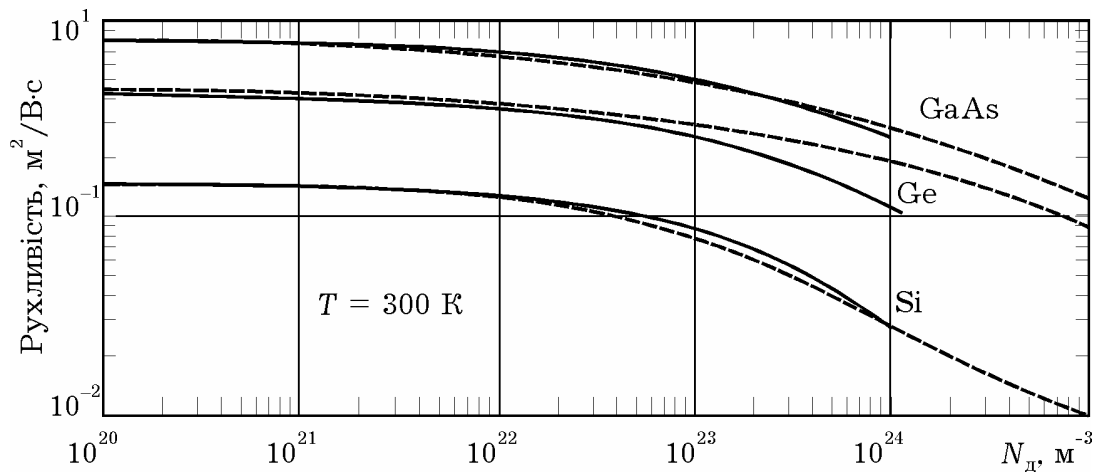


Рис. 2.25. Концентраційні залежності рухливості для кремнію, германію та арсеніду галію за кімнатної температури (штрихові лінії – експериментальні) [50]

Результати розрахунку обернених часів релаксації, що показують внесок різних механізмів розсіювання, зображено на рис. 2.26, а. За найнижчих температур домішкове розсіювання переважає як на нейтральних, так і на іонізованих атомах домішки. Воно залежить від концентрації домішки і слабшає зі зменшенням N_d і підвищенням температури. Це наочно видно на рис. 2.26, б, де зображено температурну залежність рухливості.

Зі зростанням температури зростає і роль фононних механізмів розсіювання. Але порівняно із кремнієм оптичне розсіювання тут має менше значення. Це проявляється у похिलішому спаданні рухливості з максимальним нахилом кривої $\mu(T)$ у логарифмічних координатах, який відповідає степеневій залежності $T^{-1,6}$.

Як і для кремнію, але ще помітніше, обчислені за $T = 300$ К (рис. 2.25) значення $\mu(N_d)$ не збігаються з експериментальними, якщо концентрації домішки більші за $10^{23} m^{-3}$. Можливо, це пов'язано з меншою енергією іонізації атомів домішки в германії і, відповідно, із ще більшим концентраційним виродженням електронів у зоні провідності. Також невинуватно великим виявився внесок розсіювання на нейтральних домішках, що особливо виявляється за високих концентрацій домішки.

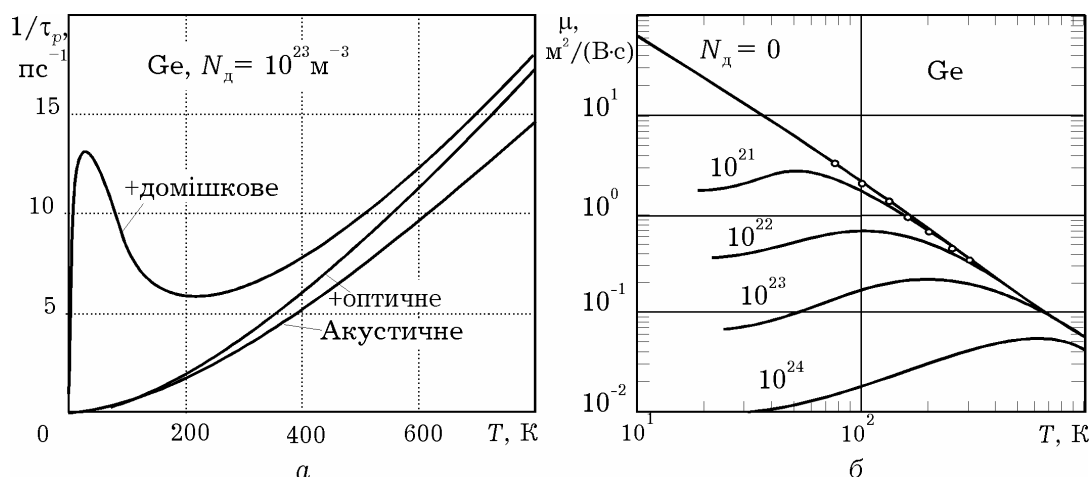


Рис. 2.26. Такі самі залежності, як і на рис. 2.24 для германію (експериментальні [46] значення для $N_d = 0$ позначено точками)

Арсенід галію. Одна з головних особливостей розсіювання в GaAs пов'язана з помітним внеском іонного зв'язку між атомами Ga і As. Це приводить до того, що з фононних механізмів основну роль відіграє полярне розсіювання за участі оптичних фононів з енергією $\hbar\omega_0 = 0,035$ еВ. Результати розрахунку швидкості цього виду розсіювання (2.14) і відповідного часу релаксації (2.26) суттєво залежать від точності задання близьких значень статичної і високочастотної діелектричних проникностей $\epsilon_{ст}$ і ϵ_∞ , які пов'язані виразом (2.2) із значеннями частот ω_{LO} і ω_{TO} відповідно поздовжньої й поперечної мод фононного спектра (рис. 2.16, в) за $k_\phi = 0$. Результати для значення $\omega_{LO}/\omega_{TO} = (\epsilon_{ст}/\epsilon_\infty)^{1/2} = 1,15$ зображено на рис. 2.27. Цей вид розсіювання виявляється за температур вищих 100 К й за кімнатної температури переважає (якщо немає домішкового розсіювання).

Ще одна суттєва відмінність пов'язана з особливістю закону дисперсії GaAs і зі структурою його долин [46]. Крім нижньої Γ -долини біля дна зони провідності з ізотропною ефективною масою $m_\Gamma^* = 0,067m$ існують і більш високі: вісім L-долин (як для германію) на межі зони Бріллюена ($M_L = 4$) на відстані вздовж осі енергії $\Delta_{\Gamma L} = 0,33$ еВ із сильно анізотропною ефективною масою $m_t^*/m_l^* = 0,075/1,9$, а також на відстані $\Delta_{\Gamma X} = 0,55$ еВ шість X-долин, як для кремнію, але не в точках Δ ,

а на межі зони Бріллюена ($M_X = 3$), з ефективними масами $m_t^*/m_l^* = 0,23/1,3$. Наявність L-долин починає виявлятися за температури вище 600 К: взаємодія електронів з оптичними фононами з енергією $\hbar\omega_{ij} = 0,026$ еВ приводить до міждолинного розсіювання, яке спричиняє їх переходи із станів Γ -долини у стани L-долин. Для розрахунку часів релаксації цього виду розсіювання можна скористатися співвідношенням (2.32) з константами міждолинної взаємодії $D_{ij} = 10^9$ еВ/см і густиною речовини $\rho = 5,32$ г/см³.

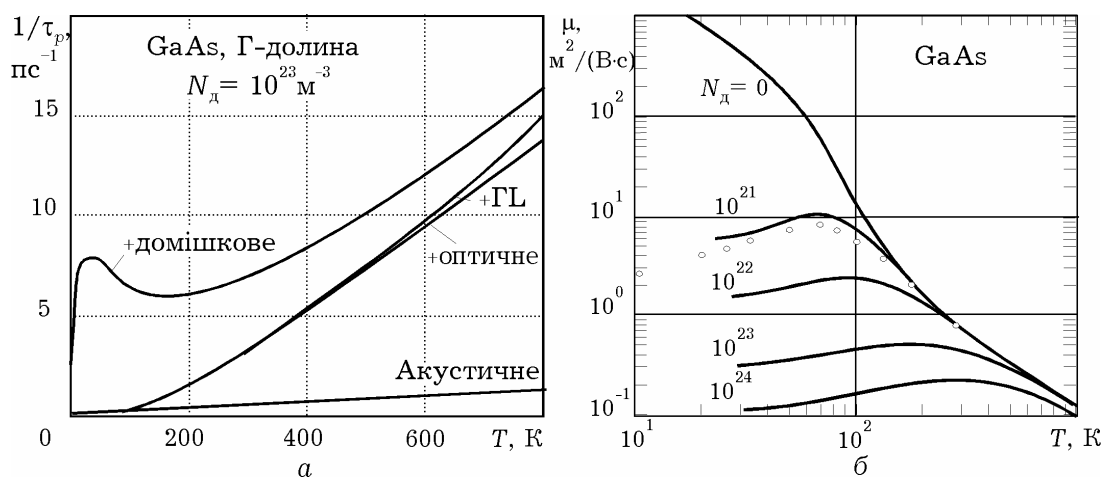


Рис 2.27. Такі самі залежності, як і на рис. 2.24 для арсеніду галію (точками позначено експериментальні значення для $N_d = 10^{21}$ м⁻³)

Акустичне розсіювання в GaAs дуже слабке і проявляється лише якщо немає конкуруючих видів розсіювання: полярного оптичного і домішкового. Це видно з рис. 2.27, б, де подано залежності рухливості від температури, для $N_d = 0$: в області температур нижче від 70 К у логарифмічних координатах залежність $\mu(T)$ має вигляд прямої з нахилом $-1,5$, характерним саме для акустичного розсіювання. За вищих температур (до 600 К) спостерігається зменшення рухливості за рахунок зростання ролі розсіювання на полярних оптичних фононах. За ще вищих температур «включаються» механізми розсіювання в L- та X-долини, що приводить до ще крутішого спадання кривої $\mu(T)$.

На тлі цих механізмів домішкове розсіювання виявляється тим сильніше, чим вища концентрація домішки, і відповідно

зростає значення температури, за якого рухливість максимальна. Тому, як і для Si та Ge, залежність рухливості від концентрації домішки (рис. 2.24) спадає тим швидше, чим вища N_d . Наведені результати розрахунків близькі до експериментальних, але розходяться з ними в області високих концентрацій, за яких починається виродження напівпровідника.

Фосфід індію. Для розрахунку часів релаксації було використано такі значення параметрів: густина – $4,8 \text{ г/см}^3$, швидкість звуку – $5,2 \cdot 10^5 \text{ см/с}$, акустичний деформаційний потенціал – $6,8 \text{ еВ}$, статична і високочастотна діелектрична проникність – $12,4$ та $9,5$ відповідно, енергія полярних оптичних фононів – 43 меВ , енергія міждолинних фононів – 30 меВ , константа міждолинного зв'язку – $1,1 \cdot 10^9 \text{ еВ/см}$. Значення параметрів матеріалів узяті переважно з книжок [50; 3]. Механізми полярного оптичного розсіювання, як і в арсеніді галію, тут переважають. Як і в GaAs, в InP можливі різні види електронних переходів між долинами за участі оптичних фононів з енергією 30 меВ . Для аналізу домішкового розсіювання тут так само використовується модель Конуелл–Вайскопфа. За найнижчих температур домішкове розсіювання переважає на іонізованих атомах домішки. Наявність домішки знижує рухливість тим більше, чим вища її концентрація. Це сильніше виявляється зі зменшенням температури, коли фононні механізми розсіювання слабшають. Тому домішкове розсіювання слабшає зі зменшенням домішки і збільшенням температури.

Результати розрахунку оберненого часу релаксації імпульсу, що показують внесок різних механізмів розсіювання, зображено на рис. 2.28, а.

Зі збільшенням температури зростає і роль фононних механізмів розсіювання, проте порівняно з GaAs оптичне розсіювання у InP має більший вплив, про що свідчить більш круте спадання рухливості з максимальним нахилом кривої $\mu(T)$ у логарифмічних координатах (рис. 2.28, б; тут же наведено результати вимірювань рухливості, взяті з сайту [46]).

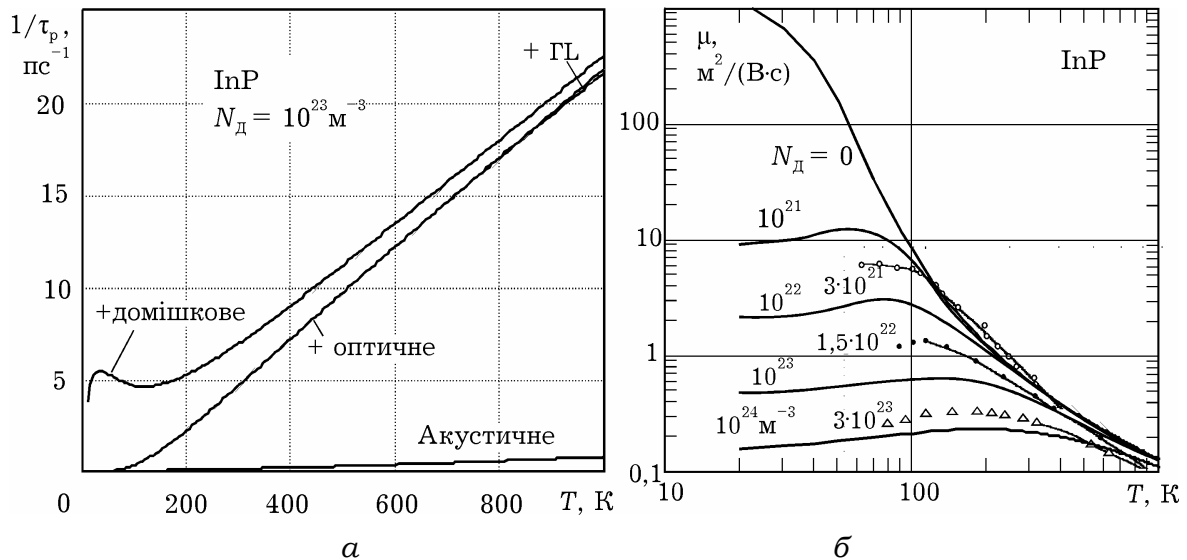


Рис. 2.28. Температурна залежність обернених часів релаксації імпульсу за концентрації домішки $N_d = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ (а) та рухливості за різних концентрацій домішки (б) для фосфіду індію (Графіки обернених часів релаксації для кожного виду підсумовуються з попереднім)

Нітрид галію. Аналогічна картина спостерігається і для нітриду галію. З фононних механізмів для GaN характерні акустичне і полярне оптичне розсіювання. Акустичне розсіювання зростає з підвищенням температури, але його внесок проявляється тільки якщо немає конкуруючих домішкового та оптичного розсіювань. Для розрахунку часу релаксації для акустичного розсіювання було використано значення акустичного деформаційного потенціалу $D_a = 10,1 \text{ еВ}$, швидкості звуку $v_{зв} = 4,57 \cdot 10^3 \text{ м/с}$, густини $\rho = 6,15 \text{ г/см}^3$ та ефективні маси густини станів відносно до кожної долини.

В нітриді галію, так само як і в інших сполуках, переважає полярне оптичне розсіювання [3], яке виявляється із підвищенням температури до 120 К. Для розрахунків часів релаксації обирались значення статичної і високочастотної діелектричної проникності 9,6 та 5,5 відповідно, енергії полярних оптичних фононів 65 меВ.

Вклад міждолинних механізмів з енергією міждолинних фононів близько 59 меВ та константою міждолинного зв'язку $1,1 \cdot 10^9 \text{ еВ/см}$ є незначним навіть за високих температур. За низьких температур зростає роль домішкового розсіювання, причому

за найнижчих температур домішкове розсіювання переважає як на нейтральних, так і на іонізованих атомах домішки.

Роль оптичних механізмів розсіювання порівняно з InP в GaN має менше значення (але більше порівняно з GaAs), що виявляється у більш пологішому спаданні кривої $\mu(T)$. Підсумком такого аналізу є залежності на рис. 2.29.

Наведені результати розрахунків близькі до відомих експериментальних, але відрізняються від них в області високих концентрацій, за яких починається виродження напівпровідника.

Значення параметрів матеріалів узято переважно з робіт [51; 3; 52]. Зауважимо, що в довідковій літературі іноді трапляється суттєва невизначеність у значеннях деяких констант. Це стосується насамперед міждолинних відстаней, акустичного й оптичного деформаційних потенціалів, констант міждолинного зв'язку, а також значень ефективних мас. Тому можна очікувати, що за інших значень параметрів результати розрахунків ще більше збігатимуться з експериментальними.

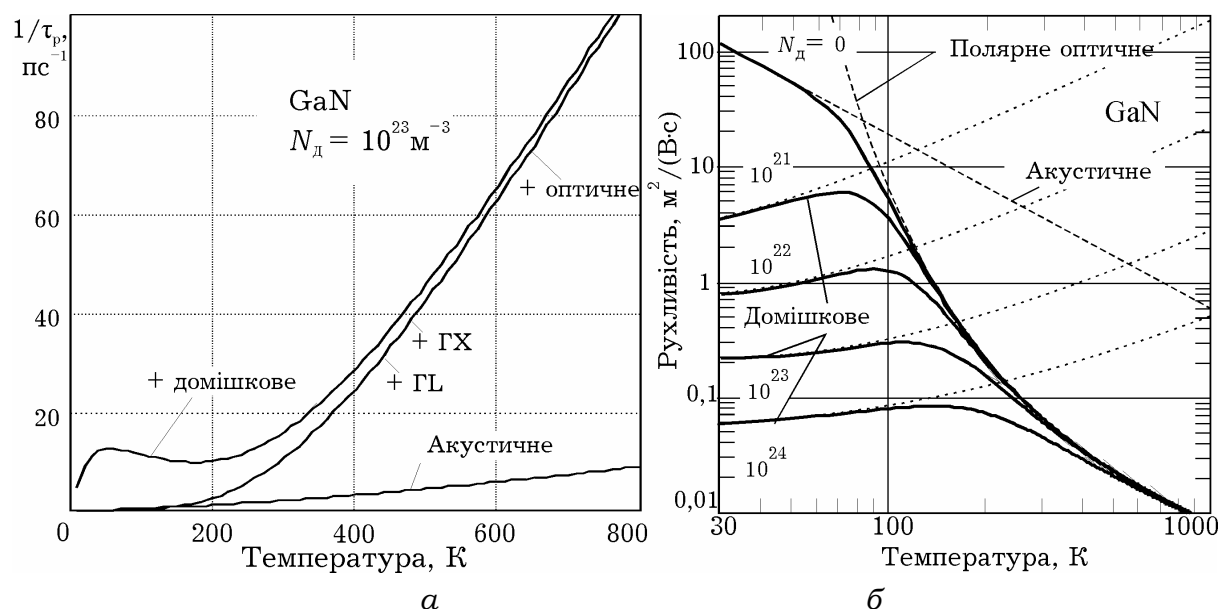


Рис. 2.29. Температурна залежність обернених часів релаксації імпульсу за концентрації домішки $N_d = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ (а) та рухливості за різних концентрацій домішки (б) для нітриду галію. Криві для кожного виду розсіювання підсумовуються з попередніми

Рекомендована література: [1]; [2]; [3]; [4]; [40]; [41]; [42]; [43]; [44]; [45]; [46]; [47]; [48]; [49]; [50]; [51]; [52].

3. ГАРЯЧІ НОСІЇ У СИЛЬНОМУ ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ

3.1. РОЗІГРІВАННЯ ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ

Для більшості мікроелектронних приладів з характерними розмірами в декілька мікрометрів і напругами у кілька вольт значення напруженості електричного поля має порядок 10^6 В/м. Такі поля зазвичай вважають сильними. Через велику різноманітність ефектів, що вони викликають, в них спостерігається відхилення від омічної залежності між струмом і напругою або між дрейфовою швидкістю та напруженістю поля. Проте різні прояви ефектів сильного електричного поля мають зазвичай одну першопричину – значне розігрівання електронного газу. Перевищення температури електронного колективу над температурою кристалічної ґратки спостерігається і в слабких полях, але воно не викликає істотної зміни кінетичних параметрів руху електронів.

Електронна температура визначає основні релаксаційні параметри електронного колективу напівпровідників, а отже, і їх кінетичні та динамічні параметри, такі як рухливість, реакцію на імпульсні й високочастотні поля тощо. Питання про міру розігрівання електронного газу в багатодолинних напівпровідниках обговорювалося вже давно [53], проте такі дослідження проводилися переважно чисельним методом Монте-Карло, що не дозволяє отримувати аналітичні співвідношення. Освоєння нових напівпровідникових матеріалів, таких як тринітриди, що відрізняються більшою шириною забороненої зони і відповідно великими міждолинними відстанями, вимагає, особливо для високочастотних застосувань, ґрунтовнішого аналізу релаксаційних параметрів з урахуванням різної міри розігрівання електронів у різних долинах.

Аналіз процесів дрейфового руху часто передбачає незалежність від електричного поля часу вільного пробігу в «одночастинковій» моделі [53] або часу релаксації імпульсу в колективній

моделі, що можливо тільки для слабких електричних полів. За цих умов швидкість дрейфового руху залишається пропорційною напруженості електричного поля, що відповідає омічній залежності між густиною струму і напруженістю. В сильних електричних полях наближення часу релаксації стає, строго кажучи, неточним, адже швидкість зміни функції розподілу перестає бути пропорційною її відхиленню від рівноважної. Але в багатьох випадках цю нелінійність можна врахувати, зберігаючи таке наближення лише формально і вважаючи час релаксації (а відповідно й рухливість) таким, що залежить від середньої енергії електрона, а отже, й від напруженості електричного поля. Це викликає нелінійність вольт-амперної характеристики однорідних зразків матеріалу.

Залежність рухливості від напруженості електричного поля можна визначити лише розглядаючи *розігрівання електронного колективу* (газу), тобто аналізуючи ступінь впливу електричного поля на середню енергію хаотичного руху, мірою якого є *електронна температура*, яку визначають зі співвідношення

$$E_T = \frac{3k_B T_e}{2}. \quad (3.1)$$

Основна фізична причина, яка пояснює підвищення електронної температури у сильних полях, – *непружність співударянь*, що формально виявляється у відмінності часу релаксації імпульсу та енергії. Електрон, прискорюючись електричним полем під час вільного пробігу, набуває імпульсу $p = m^* v$ і, відповідно, енергії $E_d = m^* v^2/2$ спрямованого дрейфового руху. Але ця спрямованість майже повністю втрачається вже після першого співударяння, яке ефективно хаотизує рух, адже час релаксації імпульсу має той самий порядок, що й середній час вільного пробігу. Проте повного розсіювання отриманої за цей час енергії не відбувається, оскільки співударяння всіх видів мають певний ступінь neprужності. Для повного розсіювання необхідним був би час, близький до τ_E , що зазвичай більший за τ_p . Залишок енергії

поповнює запас не спрямованого, а хаотичного теплового руху, що означає збільшення електронної температури, яку визначають із рівності (3.1).

Розглянемо спочатку механізм розігрівання в **одно-линній моделі**, придатній для кремнію або германію, за умови збереження в ній кількості електронів ($dn/dt = 0$), використовуючи рівняння (1.43) і (1.47) у такій формі:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} - e\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\vec{p}}{\tau_p}; \quad (3.2)$$

$$\frac{dE}{dt} - e\vec{v}\vec{\mathcal{E}} = -\frac{(E - E_0)}{\tau_E}. \quad (3.3)$$

Для кількісного аналізу розігрівання електронів необхідно з рівнянь балансу повної енергії та енергії дрейфового руху отримати рівняння балансу енергії тільки для хаотичного руху. У рівнянні балансу *повної енергії* (3.3) доданок $e\vec{v}\vec{\mathcal{E}}$ характеризує енергію, набуту від поля за одиницю часу, а доданок $(E - E_0)/\tau_E$ – втрачену в результаті зіткнень за той самий час. Щоб отримати рівняння балансу *енергії дрейфового руху* домножимо всі доданки рівняння (3.2) скалярно на \vec{v} та отримаємо

$$\frac{dE_d}{dt} - e\vec{v}\vec{\mathcal{E}} = -\frac{2E_d}{\tau_p}, \quad (3.4)$$

де права частина – це енергія дрейфу, яка втрачається за 1 с, а $\tau_p/2$ – час її релаксації. Віднімаючи рівняння (3.4) від (3.3), отримаємо рівняння балансу тільки *хаотичної (теплової) енергії*, яке й визначає динаміку зміни електронної температури:

$$\frac{dE_T}{dt} = -\frac{E_T - E_0}{\tau_E} - \frac{E_d}{\tau_E} + \frac{2E_d}{\tau_p} = -\frac{E_T - E_0}{\tau_E} + \frac{E_d}{\tau_E} \left(\frac{2\tau_E}{\tau_p} - 1 \right). \quad (3.5)$$

Доданок $2E_d/\tau_p$ дорівнює енергії дрейфу, яка за 1 с перетворюється безпосередньо в теплову, але її частина, рівна E_d/τ_E , за той самий час релаксує і переходить до кристалічної ґратки. У підсумку збільшення теплової енергії за рахунок дрейфової за 1 с становить $E_d(2\tau_E/\tau_p - 1)/\tau_E$. Відношення $2\tau_E/\tau_p \equiv \gamma$ є пара-

метром, який характеризує ефективність переходу енергії дрейфу в теплову і визначає ступінь непружності співударянь щодо напрямленої енергії. Тому розігрівання електронного газу можливе лише за умови, що швидкість розсіювання імпульсу перевищує швидкість розсіювання енергії, тобто коли $\tau_E > \tau_p/2$. І тільки за рахунок перевищення електронної температури над рівноважною ($E_0 = 3k_B T/2$), що дорівнює температурі кристалічної ґратки, можливий *стаціонарний стан*, за якого віддана та отримана електронами енергії врівноважують одна одну. Це відбувається, коли електронна температура встановлюється на рівні, який відповідає рівності

$$E_T = E_0 + E_d(\gamma - 1). \quad (3.6)$$

Беручи до уваги, що в стаціонарному стані з огляду на рівняння (3.2) швидкість дрейфу $v = e\tau_p \mathcal{E}/m^* = \mu \mathcal{E}$, де $\mu = e\tau_p/m^*$ – рухливість, отримаємо для електронної температури вираз

$$T_e = T + \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2 m^* (\gamma - 1)}{3k_B}. \quad (3.7)$$

Тут потрібно врахувати, що час релаксації для різних механізмів розсіювання досить складно залежить від електронної температури (див. розд. 2). У літературі, наприклад [2], відома залежність $T_e(\mathcal{E})$, отримана у припущенні про переважання тільки одного виду розсіювання (зазвичай акустичного), що не враховує доданка E_d/τ_E у виразі (3.5). Але питома вага різних механізмів суттєво змінюється у процесі розігрівання: у сильних електричних полях переважають механізми за участю оптичних фононів. Тому в загальному випадку отримання залежності $T_e(\mathcal{E})$ в явному вигляді практично неможливе і її доводиться знаходити як обернену до $\mathcal{E}(T_e)$:

$$\mathcal{E} = \frac{\sqrt{3k_B(T_e - T)}}{m^* \mu^2 (\gamma - 1)} = \frac{v_T}{\mu} \sqrt{\frac{T_e / T - 1}{\gamma - 1}}, \quad (3.8)$$

де v_T – рівноважна теплова швидкість «холодних» електронів, яка відповідає температурі ґратки, $v_T = \sqrt{3k_B T / m^*}$.

Кремній. На рис. 3.1 зображено залежності обернених часів релаксації імпульсу та енергії, а також коефіцієнта непружності розсіювання від електронної температури, розраховані для кремнію за $T = 300$ К за формулами, наведеними у підрозд. 2.3, для тих самих числових значень параметрів, які було використано для розрахунку слабкопольової рухливості (підрозд. 2.4). Тут потрібно звернути увагу на те, що оптичне розсіювання переважає, оскільки акустичне розсіювання через велику пружність фактично не впливає на час релаксації енергії, а домішкове помітне тільки за дуже слабкого розігрівання ($T \approx T_e$).

Характерно також, що коефіцієнт непружності γ зі зростанням електронної температури збільшується майже лінійно, — це типово для оптичних механізмів розсіювання відповідно до формули (2.38), де слід узяти $E = 3k_B T_e/2$.

Наведені результати дозволяють розраховувати важливі характеристики речовини (рис. 3.2): залежності електронної температури (а) як оберненої до (3.8), а також часів релаксації імпульсу (б) та енергії (в) від напруженості електричного поля.

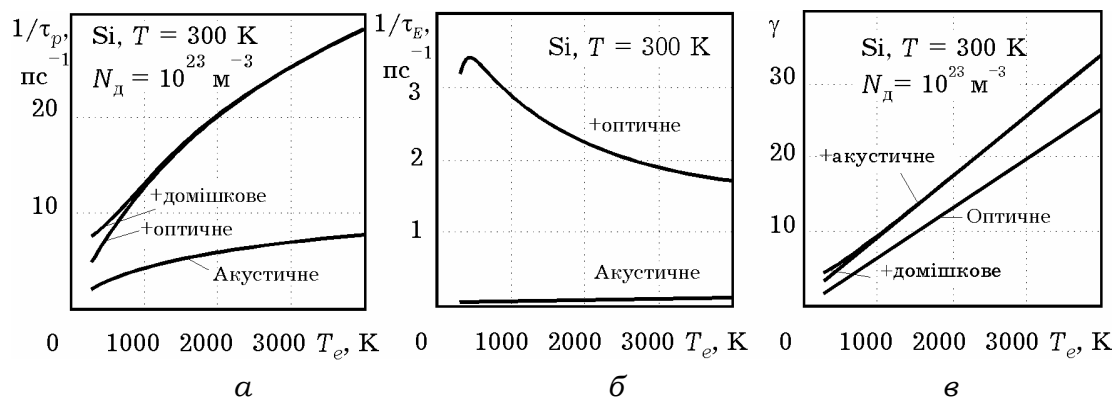


Рис. 3.1. Залежності обернених часів релаксації імпульсу (а), енергії (б) та коефіцієнта непружності (в) від електронної температури у кремнії (криві для кожного виду розсіювання підсумовуються з попередніми)

Треба звернути увагу на те, що електронна температура і час релаксації енергії майже не залежать від концентрації домішки, а час релаксації імпульсу, тобто й рухливість, цю залежність виявляють у відносно слабких полях (до 10...20 кВ/см). При цьому τ_p спадає зі збільшенням напруженості електричного

поля (у сильному полі $1/\tau_p \sim \mathcal{E}$), а τ_E зростає. У результаті посилюється нерівність $\tau_E > \tau_p$, що означає збільшення ступеня непружності розсіювання.

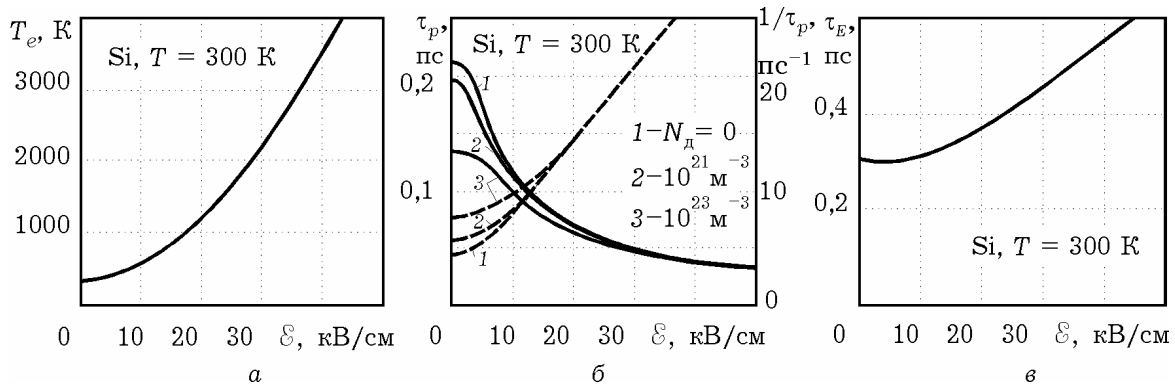


Рис. 3.2. Залежності електронної температури (а), часів релаксації імпульсу (б) та енергії (в) від напруженості електричного поля для кремнію (штрихові лінії (б) характеризують вплив концентрації домішки на обернений час релаксації імпульсу)

Германій. Подібні результати розрахунків для германію подано на рис. 3.3. Основні відмінності від кремнію пов'язані, насамперед, з переважанням у германії за високих температур акустичного виду розсіювання, що впливає на значення часу релаксації імпульсу (рис. 3.3, а) й особливо помітно збільшує час релаксації енергії (рис. 3.3, б, в). Передусім це пояснюється більшою пружністю акустичного розсіювання, що потребує збільшення кількості співударянь для розсіювання енергії, набутої в електричному полі. Характерно також, що коефіцієнт непружності γ (рис. 3.3, в) нелінійно зростає з підвищенням електронної температури, що на перший погляд суперечить співвідношенню (2.38). Але з підвищенням T_e збільшується й енергія акустичних фононів (п. 2.3.2), які можуть брати участь у розсіюванні. Тому γ зростає не так швидко, як це відбувається під час оптичного розсіювання, в якому беруть участь фонони з майже однаковою енергією, але самі значення γ майже на порядок вищі, ніж у кремнії. Крім того, більша пружність акустичних співударянь, а також вища рухливість зумовлюють більший ступінь розігрівання: у тих самих полях електронна температура в германії на порядок вища.

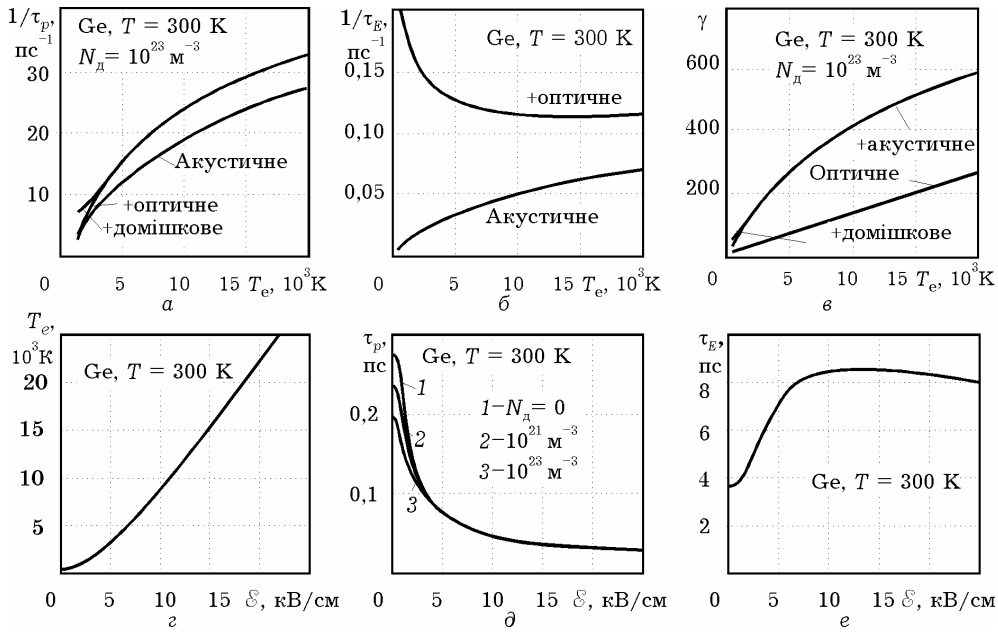


Рис. 3.3. Залежності обернених часів релаксації імпульсу (а), енергії (б) та коефіцієнта непружності (в) від електронної температури та залежності електронної температури (г), часів релаксації імпульсу (д) та енергії (е) для германію (слід звернути увагу на значно більшу вагу акустичного розсіювання)

У багатодолинних напівпровідниках типу GaAs крім Γ -долини біля дна зони провідності є й більш високі L- та X-долини. У кожній з них механізм розігрівання, у принципі, такий самий, але ситуація ускладнюється тим, що, по-перше, у різних долинах електрони мають різні параметри і ступені їх розігрівання будуть різнитися. По-друге, зі зростанням електронної температури змінюється і концентрація електронів у долинах. Вважаючи, що повна концентрація електронів $n(T)$ у зоні провідності залишається постійною і визначається температурою ґратки, а їх перерозподіл по долинах у результаті міждолинного розсіювання залежить від електронної температури, відносну заселеність долин можна охарактеризувати коефіцієнтами ($i, j = \Gamma, L, X$):

$$b_i(T_e) = \frac{n_i}{n} = \frac{n_i}{n_i + n} = \frac{1}{1 + n_j / n_i} = \frac{1}{1 + \tau_{nji} / \tau_{nij}}, \quad (3.9)$$

які визначають через концентраційні часи релаксації відповідно до співвідношення (2.32):

$$\frac{\tau_{nij}}{\tau_{nji}} = \frac{n_i}{n_j} = \left(\frac{m_{di}^*}{m_{dj}^*} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-\Delta_{ij}}{k_B T_e} \right).$$

Вираз (3.9) легко узагальнити і на випадок трьох долин.

Вихідними рівняннями для багатодолинної моделі необхідно вибирати рівняння балансу імпульсу та енергії електронного колективу у формі рівнянь (3.2) і (3.3) для кожної долини. Відповідно рівняння балансу тільки для теплової енергії можна отримати підсумовуванням рівнянь типу (3.5) з ваговими коефіцієнтами, які дорівнюють відносній заселеності долин b_i . Уводячи поняття середньої теплової енергії електронів $E_T = b_\Gamma E_{T\Gamma} + b_L E_{TL}$ (для стислості запису розглянемо тільки дводолинну ΓL -модель), отримаємо для обчислення її значення у стаціонарному стані:

$$E_T = E_0 + b_\Gamma E_{d\Gamma} (\gamma_\Gamma - 1) + b_L E_{dL} (\gamma_L - 1). \quad (3.10)$$

Звідси й установлюють зв'язок між середньою для долин електронною температурою і напруженістю електричного поля:

$$T_e = T + \mathcal{E}^2 \frac{[b_\Gamma \mu_\Gamma^2 m_\Gamma^* (\gamma_\Gamma - 1) + b_L \mu_L^2 m_L^* (\gamma_L - 1)]}{3k_B}. \quad (3.11)$$

Так само, як для однодолинної моделі, залежність електронної температури від напруженості електричного поля знаходять як обернену до $\mathcal{E}(T_e)$:

$$\mathcal{E} = \sqrt{\frac{3k_B(T_e - T)}{b_\Gamma \mu_\Gamma^2 m_\Gamma^* (\gamma_\Gamma - 1) + b_L \mu_L^2 m_L^* (\gamma_L - 1)}}, \quad (3.12)$$

оскільки параметри b_i , μ_i , γ_i є функціями електронної температури.

Тут потрібно мати на увазі, що у вираз (3.12) входить деяка усереднена за долинами температура. Але, як уже зазначалося, через відмінності параметрів електронів у різних долинах міра розігрівання в них може істотно різнитися. У доданку виразу (Д3.1) порівняні електронні температури у різних долинах деяких напівпровідників. Результати розрахунків, наведені на рис. Д3.1 додатків, показують, що міра розігрівання електронів у верхній долині істотно нижча, ніж у нижній. Це дає змогу за потреби знаходити часи релаксації, вважаючи, що електронна температура для верхньої долини рівна температурі ґратки.

Арсенід галію. Результати розрахунків оберненого часу релаксації імпульсу та енергії в Γ - та L-долинах залежно від електронної температури за $T = 300$ К показано на рис. 3.4 у вигляді діаграм, де крива для кожного виду розсіювання підсумовується з попередньою.

Порівнявши ці результати з відповідними швидкостями розсіювання на рис. 2.19, слід звернути увагу на те, що домішкове розсіювання як пружне не бере участі в розсіюванні енергії та є суттєвим тільки для Γ -долини, причому його роль слабшає з підвищенням електронної температури, акустичне ж впливає, фактично, тільки на час релаксації імпульсу. Міждолинне розсіювання стає помітним у Γ -долині лише за температур, вищих за 1000 К, а в L-долині можна знехтувати розсіюванням у Γ -долину через низьку густину станів у ній.

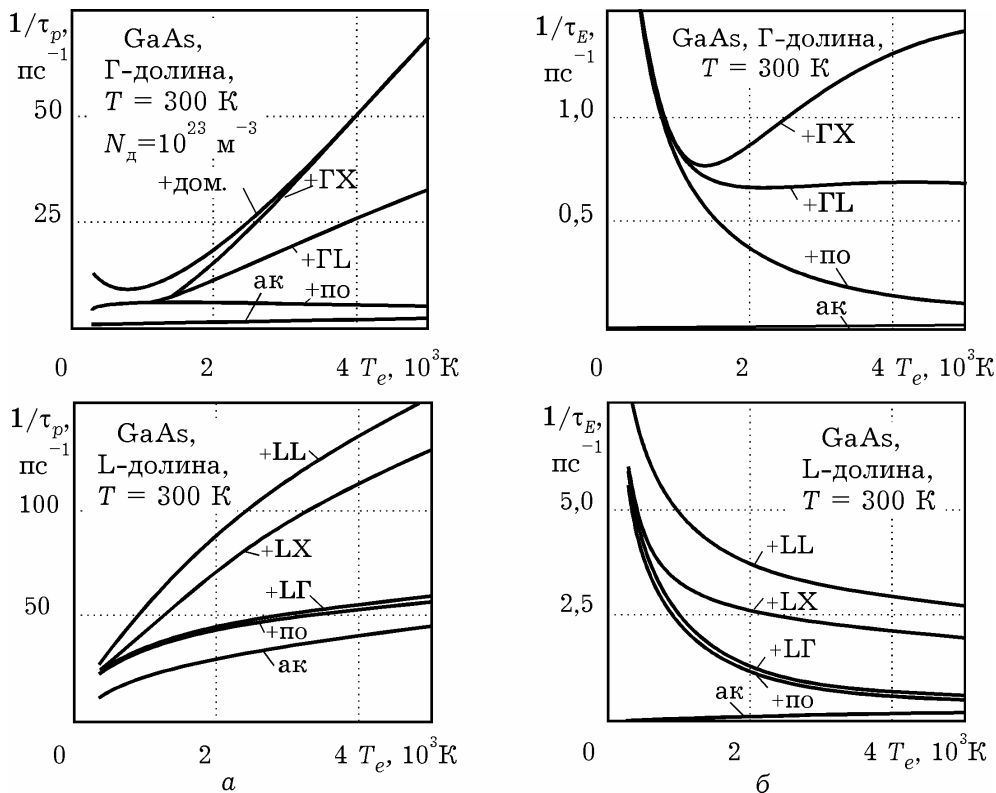


Рис. 3.4. Залежності обернених часів релаксації імпульсу (а) та енергії (б) від електронної температури в Γ - (верхній ряд) і L- (нижній ряд) долинах (криві для кожного виду розсіювання підсумовуються з попередніми)

Знання часів релаксації в окремих долинах і розрахунок заселеностей долин (3.9) з використанням виразу (2.36) дозволяє

знайти залежність (3.12) між електронною температурою та напруженістю електричного поля, а за нею визначити поле-температурну характеристику $T_e(\mathcal{E})$. На цій залежності (рис. 3.5, а) можна виділити три характерні ділянки: область слабких полів з напруженістю менше 4 кВ/см, де розігрівання визначається, фактично, тільки параметрами Γ -долини, перехідну область (до 20...30 кВ/см), у якій суттєво змінюється заселеність долин, та область дуже сильних полів, для якої характерне заповнення електронами переважно верхніх долин (рис. 3.5, б) та повільне, майже лінійне зростання електронної температури.

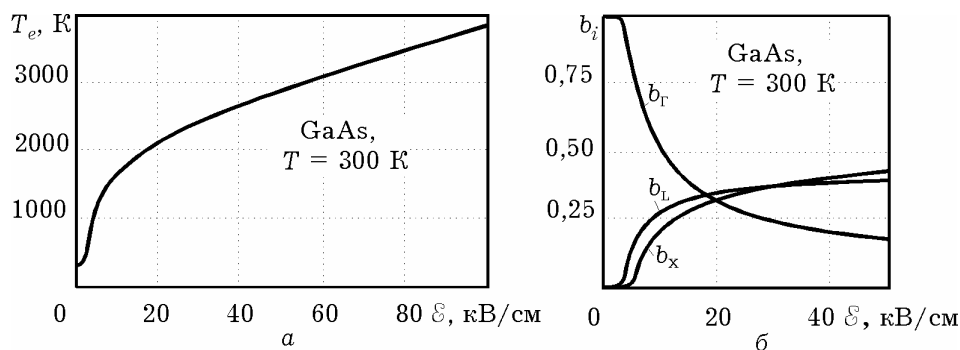


Рис. 3.5. Залежності електронної температури (а) й заселеності долин (б) від напруженості електричного поля в арсеніді галію для кімнатної температури

Фосфід індію. Залежності часів релаксації для фосфіду індію розраховано за температури $T = 300$ К для тих самих значень параметрів, які були використані для розрахунку слабопольової рухливості. В InP переважає оптичне розсіювання. Як і в GaAs, механізми акустичного розсіювання через велику пружність фактично не впливають на час релаксації імпульсу та енергії в Γ -долинах, але є вагомими для L-долин. Міждолинне розсіювання стає помітним лише за температур, вищих за 1200 К. Так само, як і для арсеніду галію, розсіюванням з L-долини в Γ -долину можна знехтувати через низьку густину станів у ній, при цьому досить вагомим є внесок еквівалентного міждолинного LL-розсіювання. Домішкове розсіювання на іонізованих атомах помітне лише в Γ -долині, причому воно має значення за низьких температур і зі зростанням електронної температури його внесок зменшується. Результати розрахунків зображено на рис. 3.6.

Поле-температурна характеристика фосфіду індію подібна до GaAs (рис. 3.7). Тут також можна виділити три ділянки. Область слабких полів з напруженостями меншими за 10 кВ/см, в якій, як і в арсеніді галію, розігрівання електронного газу визначається виключно параметрами Γ -долин. Перехідна область, де відбувається значний перерозподіл електронів між долинами, займає ділянку приблизно до 20 кВ/см. Область дуже сильних полів (понад 20 кВ/см) зумовлена заповненням електронами переважно L-долин та порівняно малим внеском електронів X-долин. На відміну від GaAs, у InP відбувається більш стрімке зростання електронної температури і значення $T_e = 3500$ К досягається вже за напруженостей приблизно 60 кВ/см (рис. 3.7).

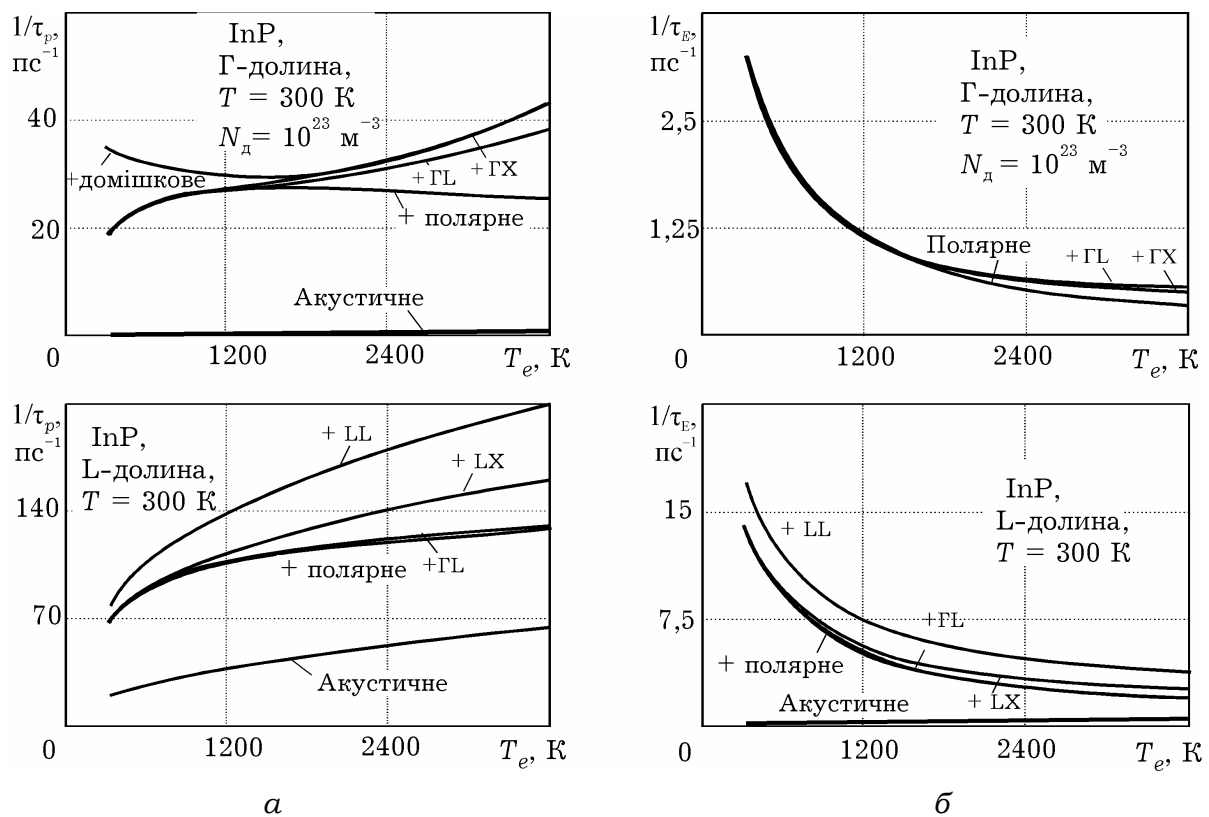


Рис. 3.6. Залежність обернених часів релаксації імпульсу (а) та енергії (б) від електронної температури в Γ - (верхній ряд) і L- (нижній ряд) долинах для фосфіду індію (криві для кожного виду розсіювання підсумовуються з попередніми)

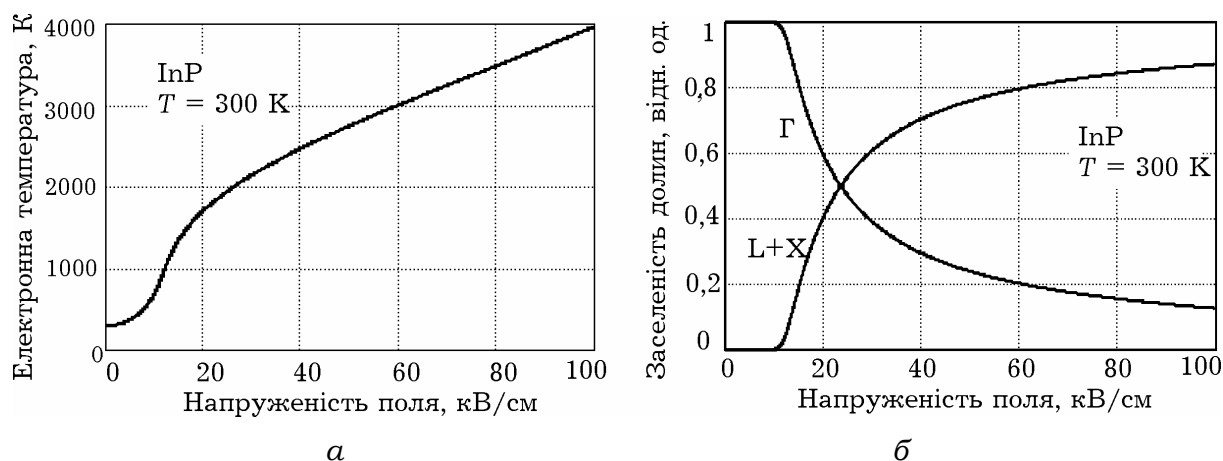


Рис. 3.7. Поле-температурна залежність (а) і залежність заселеності долин від напруженості електричного поля (б) в InP для кімнатної температури

Нітрид галію. Аналогічна ситуація спостерігається і для кубічної структури нітриду галію: переважають механізми оптичного розсіювання; акустичне, через пружність, майже не впливає на час релаксації і значиме лише для X-долин. Між-долинне розсіювання досить вагомо проявляється у Γ -долині у разі підвищення температури до 2500 К, що видно з діаграм, поданих на рис. 3.8.

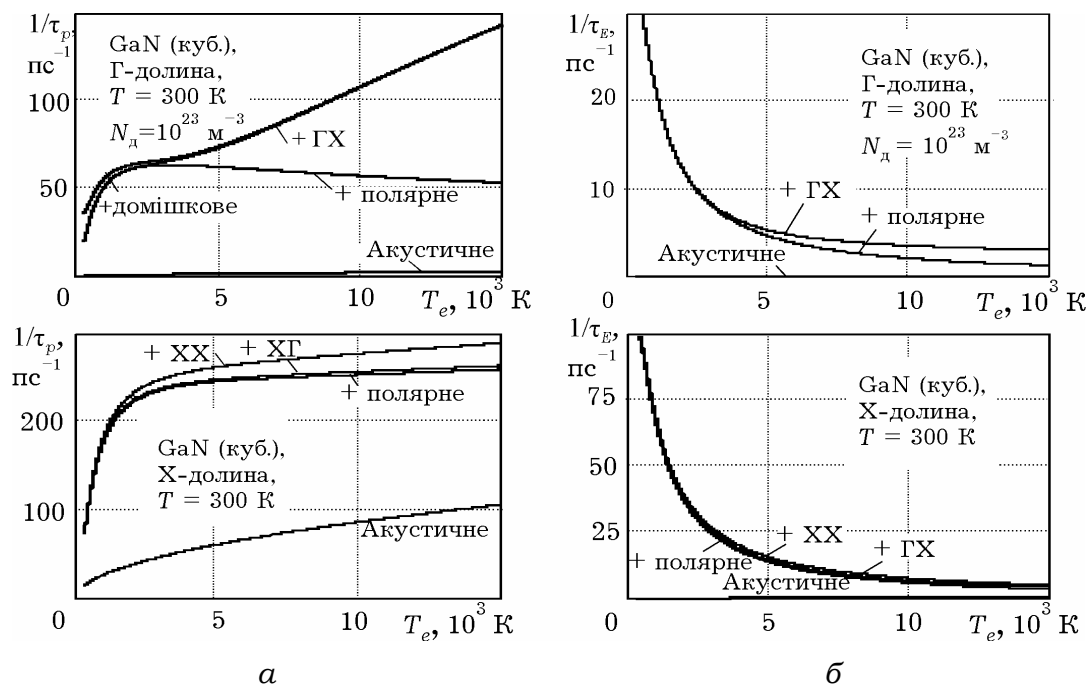


Рис. 3.8. Залежність обернених часів релаксації імпульсу (а) та енергії (б) від електронної температури в Γ - (верхній ряд) і X- (нижній ряд) долинах для нітриду галію (криві для кожного виду розсіювання підсумовуються з попередніми)

Подібна, але кількісно відмінна картина спостерігається для поле-температурної характеристики нітриду галію, в якому помітне зростання електронної температури проявляється лише з позначки 120...125 кВ/см, а в області сильних полів (починаючи з 200 кВ/см) відбувається досить швидко зростання електронної температури і досягаються значення порядку 10^4 К (рис. 3.9).

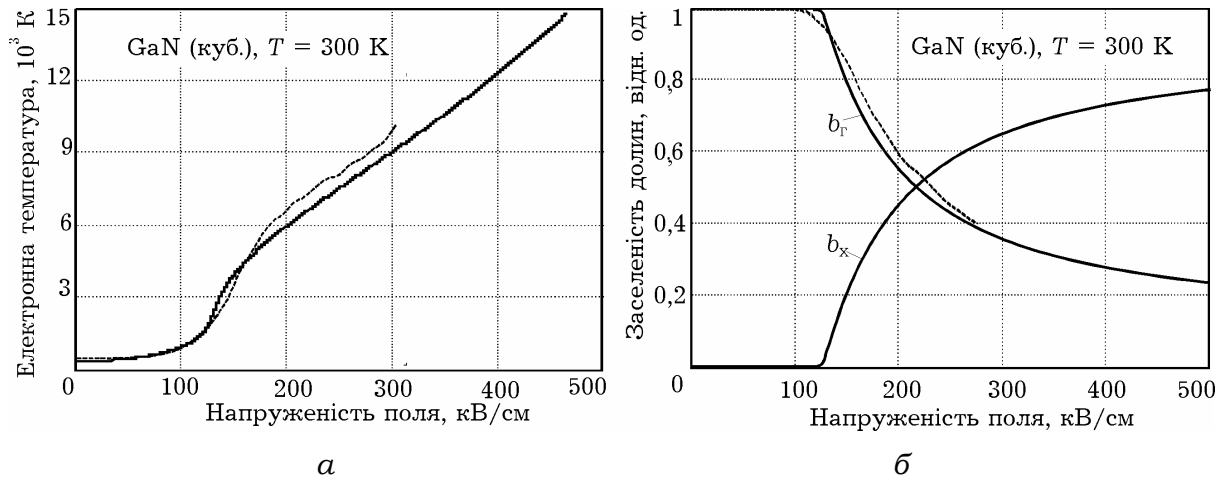


Рис. 3.9. Поле-температурна залежність (а) і залежність заселеності долин від напруженості електричного поля (б) в GaN для кімнатної температури (штрихові лінії взято з [46; 54])

Отримані результати дозволяють подати через функції напруженості поля, а не електронної температури, й інші важливі характеристики, усереднені за долинами (рис. 3.10 на прикладі арсеніду галію):

– рухливість:

$$\mu = b_{\Gamma} \mu_{\Gamma} + b_L \mu_L; \quad (3.13)$$

– омічну ефективну масу (рис. 3.10, а):

$$\frac{1}{m^*} = \frac{b_{\Gamma}}{m_{\Gamma}^*} + \frac{b_L}{m_L^*}; \quad (3.14)$$

– час релаксації імпульсу (рис. 3.10, б):

$$\tau_p = \frac{\mu m^*}{e}; \quad (3.15)$$

– час релаксації енергії (рис. 3.10, в):

$$\tau_E = \frac{\tau_p}{2} + \frac{3k(T_e - T)}{2e\mu\mathcal{E}^2}. \quad (3.16)$$

Вираз (3.16) впливає з рівняння (3.6) й виразів для коефіцієнта непружності γ та енергії дрейфового руху E_d . Отриманий таким чином набір усереднених за долинами параметрів у вигляді функцій від \mathcal{E} дозволяє використовувати рівняння однодолинної моделі для багатодолинних напівпровідників у наближенні заданого поля.

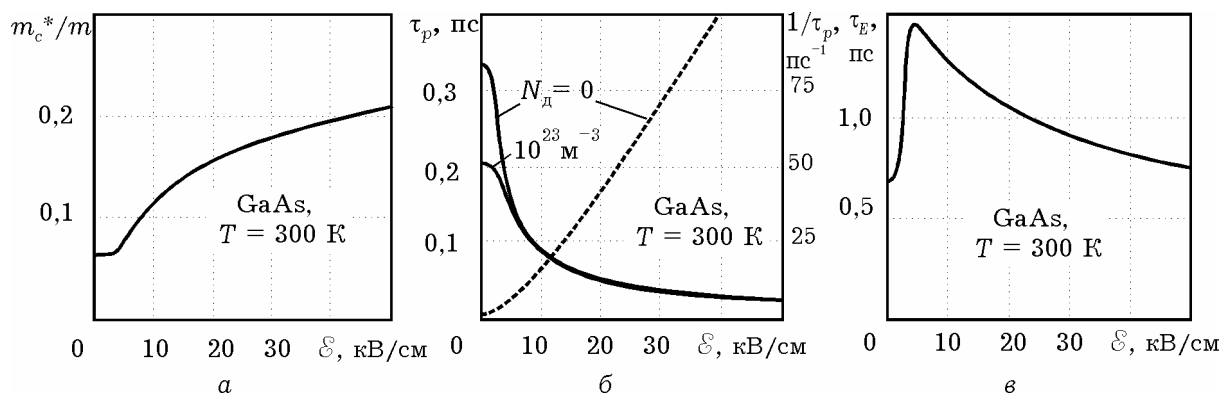


Рис. 3.10. Залежності усереднених за долинами зведеної ефективної маси (а), часів релаксації імпульсу (б) та енергії (в) від напруженості електричного поля для арсеніду галію (штрихова лінія (б) – обернений час релаксації імпульсу)

3.2. НАСИЧЕННЯ ДРЕЙФОВОЇ ШВИДКОСТІ

Розігрівання електронного газу в сильних електричних полях супроводжується *насиченням дрейфової швидкості*, тобто виникненням ситуації, коли спрямована швидкість стає майже незалежною від напруженості поля, а на вольт-амперній характеристиці з'являється горизонтальна ділянка.

Найпростіше уявлення про причини такого явища можна скласти на прикладі одночастинкової моделі дрейфу [53], де середній час вільного пробігу обернено пропорційний середній швидкості, яка має як хаотичну (теплову), так і спрямовану (дрейфову) складові. У слабких електричних полях $v_{др} \ll v_{хаот}$ і середня швидкість визначається тільки хаотичною складовою, тому рухливість залишається постійною, а вольт-амперна характеристика – лінійною. Але в міру того, як із зростанням \mathcal{E} дрейфова швидкість стає сумірною з хаотичною, середня швидкість на вільному пробігу зростає як за рахунок дрейфової

складової, так і за рахунок хаотичної, яка збільшується із розігріванням електронного газу. У результаті зменшується час вільного пробігу і рухливість, а вольт-амперна характеристика стає похилішою з тенденцією до насичення. Звідси випливає і можливий критерій для визначення терміна «сильне електричне поле»: у ньому дрейфова та хаотична складова швидкості електронів співмірні.

Повніше описати це явище можна з використанням колективної моделі дрейфу. Як видно на прикладі кремнію (рис. 3.2, б), обернений час релаксації імпульсу зростає зі збільшенням напруженості поля майже лінійно. Це відбувається за $\mathcal{E} > 10\ldots 20$ кВ/см, коли переважає розсіювання за участю оптичних фононів, причому здебільшого з їх збудженням. За цих умов дрейфова швидкість електронів не може перевищити деяке значення v_n , оскільки чим більша напруженість поля, тим пропорційно вища швидкість розсіювання. Тому тільки-но прискорюваний полем електрон досягне певної (в середньому) швидкості, що дорівнює швидкості насичення v_n , з великою ймовірністю відбудеться розсіювання зі збудженням оптичного фонона і відповідним зменшенням енергії електрона на величину $\hbar\omega_0$. Отже, зростання напруженості електричного поля приводить до збільшення не дрейфової, а хаотичної швидкості, тобто електронної температури.

Аргументом на користь такого уявлення є те, що в германії, в якому переважає акустичне розсіювання, перехід до режиму насичення помітно «затягнуто» в область високих електронних температур, а в режимі насичення спостерігається помітне підвищення швидкості.

Щоб зрозуміти чинники, які визначають швидкість насичення, іноді використовують таку просту модель. Відповідно до рівняння балансу імпульсу (3.2) розсіяний за час τ_p імпульс $m^* v_n$ дорівнює набутому від поля $-e\mathcal{E}\tau_p$, а відповідно до рівняння балансу енергії (3.1) для дрейфового руху набутого від поля за той самий час енергія дрейфу $e v_n \mathcal{E} \tau_p$ у стаціонарному стані дорівнює

енергії випромінюваного фонона $\hbar\omega_o$. Вилучивши з цих рівностей напруженість електричного поля, отримаємо

$$v_H = \left(\frac{\hbar\omega_o}{m^*} \right)^{1/2}. \quad (3.17)$$

Це співвідношення, використовуване зазвичай у навчальній літературі [55], слід сприймати лише як оціночне. Щоб отримати більш точні розрахункові співвідношення, потрібно враховувати особливості механізмів розсіювання у конкретних матеріалах.

Кремній. Домноживши співвідношення (3.8) на рухливість, отримаємо вираз для дрейфової швидкості:

$$v = v_T \sqrt{\frac{T_e / T - 1}{\gamma - 1}}. \quad (3.18)$$

Цей вираз дозволяє, розрахувавши часи релаксації з урахуванням отриманого раніше зв'язку між електронною температурою і напруженістю електричного поля, отримати поле-швидкісну характеристику $v(\mathcal{E})$. Для кремнію її подано на рис. 3.11: у слабких полях швидкість пропорційна напруженості, а в сильних ($\mathcal{E} > 20$ кВ/см) маємо дуже похилу ділянку, яка і відповідає насиченню. У цьому режимі швидкість майже не залежить від концентрації домішки, що свідчить про незначну роль домішкового розсіювання і, відповідно, про переважання фононних механізмів у сильних електричних полях.

Для детальнішого аналізу впливу різних чинників на швидкість насичення та для отримання відповідних аналітичних співвідношень необхідно припустити, що, по-перше, частка акустичного розсіювання навіть у сильних полях залишається помітною порівняно з часткою оптичного.

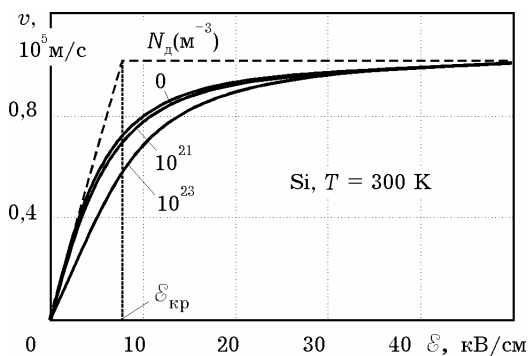


Рис. 3.11. Залежність дрейфової швидкості від напруженості електричного поля в кремнії за різних концентрацій домішки та її кусково-лінійна апроксимація (штрихова лінія)

До того ж співвідношення між ними залишається постійним, оскільки за великих електронних температур ($k_B T_e \gg \hbar \omega_o$) параметр $t_e = \hbar \omega_o / 2k_B T_e$ малий і $K_1(t_e) \approx 1/t_e$. За цих умов для обчислення оберненого часу релаксації імпульсу для оптичного розсіювання (2.26) можна використовувати простіший вираз:

$$\frac{1}{\tau_{po}} \approx \frac{m^{*3/2} D_o^2}{\pi^{3/2} \rho \hbar^2} \frac{\sqrt{2k_B T_e}}{\hbar \omega_o \operatorname{sh} t}. \quad (3.19)$$

Оскільки час релаксації імпульсу для акустичного розсіювання (2.24) також пропорційний $\sqrt{T_e}$, то їх відношення, яке становить

$$\frac{\tau_{po}}{\tau_{pa}} = \sqrt{\frac{3\pi}{2}} \frac{D_a^2 \hbar \omega_o \operatorname{sh} t}{D_o^2 (\hbar v_{зв})^2} k_B T, \quad (3.20)$$

не залежить від електронної температури. Зокрема, для кремнію за кімнатної температури воно приблизно дорівнює 0,38. Це дає підстави вважати, що загальний час релаксації імпульсу пропорційний часу оптичної релаксації і його можна подати у такому вигляді:

$$\tau_p = \frac{\tau_{po}}{1 + \tau_{po} / \tau_{pa}}. \quad (3.21)$$

По-друге, коефіцієнт непружності співударянь $\gamma = 2\tau_E / \tau_p$ залежить від T_e майже лінійно (див. рис. 3.1, в). Якщо знехтувати релаксією енергії за рахунок майже пружного акустичного розсіювання і вважати, що τ_E визначається тільки оптичним розсіюванням ($\tau_E = \tau_{Eo}$), то з урахуванням виразу (3.21) отримаємо

$$\gamma = \gamma_o \left(1 + \frac{\tau_{po}}{\tau_{pa}} \right), \quad (3.22)$$

де γ_o – коефіцієнт непружності оптичного розсіювання, який визначають відповідно до виразу (2.40):

$$\gamma_o = \frac{2\tau_{Eo}}{\tau_{po}} = 6 \frac{T_e}{T} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_o} \right)^2 = \frac{3}{2t t_e} = \frac{3}{2t^2} \frac{T_e}{T}. \quad (3.23)$$

У результаті повний коефіцієнт непружності зручно подати у вигляді

$$\gamma = \frac{3(1 + \tau_{po} / \tau_{pa})}{2t^2} \frac{T_e}{T} \equiv \beta \frac{T_e}{T}, \quad (3.24)$$

звідки наочно видно, що він пропорційний електронній температурі.

Коефіцієнт пропорційності β , що є коефіцієнтом непружності фононного розсіювання за $T = T_e$, по-перше, не залежить від T_e , а лише від температури ґратки T , і, по-друге, найчастіше має значення, більші за одиницю. Наприклад, для кремнію $\beta = 2,6$ за $T = 300$ К. Це дозволяє за великих електронних температур знехтувати одиницею у знаменнику та чисельнику виразу (3.18) й отримати для швидкості насичення

$$v_n = \frac{v_T}{\sqrt{\beta}} = \frac{v_T}{\sqrt{6(1 + \tau_{po} / \tau_{pa})}} \frac{\hbar\omega_o}{k_B T}. \quad (3.25)$$

Значення v_T пропорційне $T^{1/2}$, тому, якщо відношення τ_{po}/τ_{pa} мале, швидкість насичення можна наближено вважати пропорційною $T^{-1/2}$. Характерно також, що значення v_n не залежить від концентрації домішки, адже в області насичення переважають оптичні механізми розсіювання.

У підсумку прийняті наближення дозволяють для обчислення поле-швидкісної характеристики замість виразу (3.18) використовувати більш простий вираз:

$$v = v_n \sqrt{\frac{T_e / T - 1}{T_e / T - 1 / \beta}}. \quad (3.26)$$

За відомих значень v_n і слабопольової рухливості μ_0 іноді використовують кусково-лінійну апроксимацію (див. рис. 3.11) поле-швидкісної характеристики $v(\mathcal{E})$:

$$v = \mu_0 \mathcal{E} \text{ за } \mathcal{E} < \mathcal{E}_{кр}; \quad v = v_n \text{ за } \mathcal{E} > \mathcal{E}_{кр}, \quad (3.27)$$

де \mathcal{E} – критична напруженість поля, що відповідає умовній межі між сильними та слабкими полями, $\mathcal{E}_{кр} = v_n / \mu_0$. Така

апроксимація зручна, оскільки використані параметри ν_n та μ_0 можна відносно просто ідентифікувати.

Ще зручнішою і досить точною може бути явна залежність $\nu(\mathcal{E}) = \mu(\mathcal{E})\mathcal{E}$, в якій залежність рухливості від поля задано наближеним виразом

$$\mu(\mathcal{E}) = \frac{\mu_0}{\left[1 + (\mathcal{E} / \mathcal{E}_{\text{кр}})^2\right]^{1/2}}. \quad (3.28)$$

Цю залежність можна використовувати тільки для фононних механізмів розсіювання: вплив домішки тут помітний у слабких полях і його можна наближено врахувати, якщо в чисельнику замість μ_0 використати рухливість $\mu(N_d)$ для певної концентрації домішки, але $\mathcal{E}_{\text{кр}}$ слід розраховувати через μ_0 .

Германій. Переважання акустичного розсіювання викликає, як зазначалось у попередньому розділі, нелінійність залежності $\gamma(T_e)$, але незважаючи на це, загальний коефіцієнт непружності зручно подати, як і для кремнію, через коефіцієнт непружності тільки для оптичного розсіювання. При цьому, на відміну від виразу (3.22), не можна нехтувати внеском акустичного розсіювання в релаксацію енергії, і цей зв'язок матиме вигляд

$$\gamma = \gamma_0 \frac{1 + \tau_{po} / \tau_{pa}}{1 + \tau_{Eo} / \tau_{Ea}}. \quad (3.29)$$

Коефіцієнт непружності оптичного розсіювання γ_0 пропорційний T_e і за характерних для германію параметрів становить близько $3,7 T_e/T$. Відношення часів релаксації імпульсу в чисельнику виразу (3.29), як і в рівнянні (3.20), не залежить від T_e і має значення 2,7 за $T = 300$ К. Але відношення часів релаксації енергії за високих електронних температур залежить від T_e майже лінійно: $\tau_{Eo}/\tau_{Ea} \approx 0,014 T_e/T$, – тому повний коефіцієнт непружності можна подати так само, як і у виразі (3.24), у формі $\gamma = \beta T_e/T$, але коефіцієнт β зменшується зі зростанням T_e за законом $\beta \approx \beta_0/(1 + 0,014 T_e/T)$, де $\beta_0 \approx 10,2$.

Отже, можна вважати, що відповідно до виразу (3.18) за $T_e/T \gg 1$ настає насичення, але в режимі насичення спостерігається відносно повільне зростання швидкості дрейфу. Це уявлення підтверджують результати розрахунків, наведені на рис. 3.12, де зображено поле-швидкісну характеристику (а) і залежність рухливості від напруженості електричного поля (б), отримані з урахуванням поле-температурної характеристики $T_e(\mathcal{E})$ (див. рис. 3.3, з).

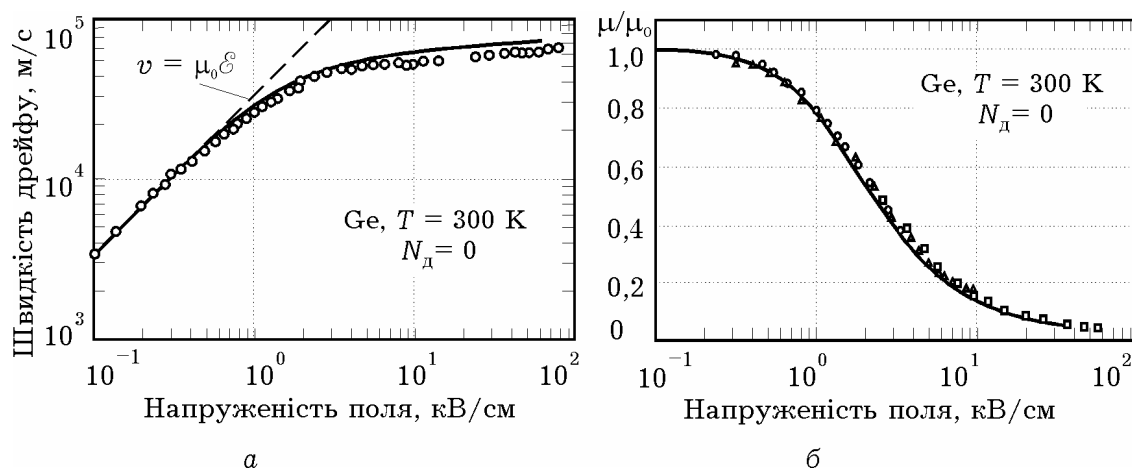


Рис. 3.12. Залежності дрейфової швидкості (а) і нормованої на слабо-польове значення рухливості (б) від напруженості електричного поля в германії за кімнатної температури

На рисунках також наведено результати експериментів, узяті з книги [56], де описано дані, отримані з різних першоджерел.

Арсенід галію. Поле-швидкісна характеристика GaAs має принципово інший вигляд, що пов'язано передусім з багатодолинною структурою закону дисперсії, а також особливостями механізмів розсіювання в різних долинах.

У центральній Γ -долині за відносно невеликого розігрівання ($T_e \approx 1000$ K) з фононних механізмів переважає полярне оптичне розсіювання (рис. 3.4, а). Акустичне впливає тільки на розсіювання імпульсу і його внесок визначається відношенням $\tau_{\text{рпо}}/\tau_{\text{ра}}$, яке в широкій області електронних температур не перевищує 0,1. Оцінка швидкості насичення, яку забезпечують

полярні оптичні фоони з енергією $\hbar\omega_0 = 0,034$ еВ, за формулою, аналогічною до (3.25), дає значення $v_H' \approx 2,2 \cdot 10^5$ м/с. Але через особливості полярного оптичного розсіювання значення $1/\tau_{рпо}$ спадає зі зростанням T_e і швидкість зменшується, що частково підтверджує верхня крива на рис. 3.13, а.

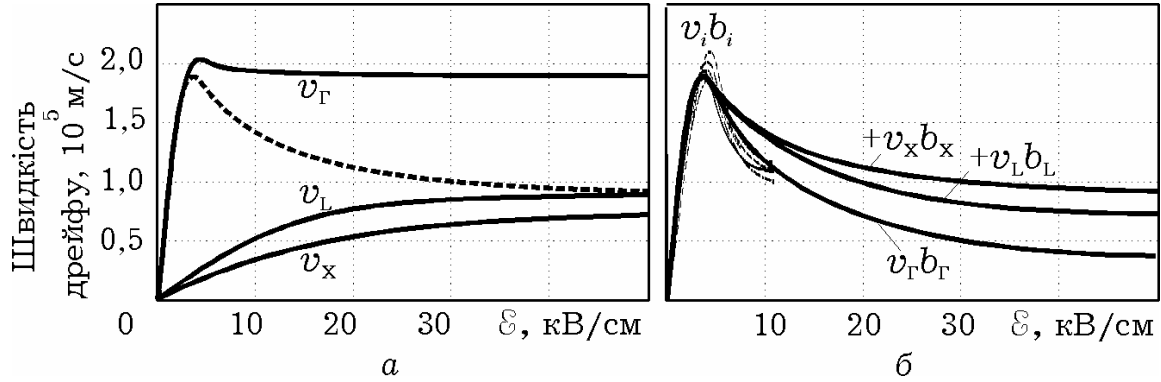


Рис. 3.13. Залежність від напруженості електричного поля швидкості дрейфу електронів для кожної долини та їх усереднена залежність (штрихова лінія) (а); та сама залежність, побудована підсумовуванням швидкостей в окремих долинах з ваговими коефіцієнтами, рівними їх заселеностям (б): штрихові лінії від 0 до 10 кВ/см взято з робіт [5; 57]

Спадання припиняється, коли за електронних температур близько 1500 К «включаються» механізми міждолинного розсіювання, в яких беруть участь фоони з енергією $\hbar\omega_{ij} \approx 0,8\hbar\omega_0 = 0,26$ еВ. За великих електронних температур ці механізми переважають і загальний коефіцієнт непружності за цих умов зручно виразити через його значення для міждолинного розсіювання:

$$\gamma = \gamma_{ij} \frac{1 + \tau_{rij} / \tau_{рпо}}{1 + \tau_{Eij} / \tau_{Eпо}}. \quad (3.30)$$

Така форма подання дозволяє розраховувати швидкість насичення за формулою (3.25), але з використанням параметрів міждолинних фоонів і поправкового коефіцієнта, що враховує внесок інших фоонів, у вигляді дробу з останнього виразу. Для Γ -долини, наприклад, за $T_e = 6000$ К, цей коефіцієнт дорівнює 1,02 і прямує до одиниці із подальшим підвищенням електронної температури. Тому з достатньою точністю можна вважати,

що за цих умов непружність співударянь визначається тільки непружністю міждолинного розсіювання, яка відповідно до формули (2.38) лінійно зростає зі збільшенням T_e/T у сильних електричних полях з коефіцієнтом пропорційності $\beta \approx 6,2$. Оскільки ж теплова швидкість електронів у Γ -долині $v_{\Gamma} = \sqrt{3k_B T / m_{\Gamma}^*}$, що за кімнатної температури становить $4,6 \cdot 10^5$ м/с, то швидкість дрейфу досягає значення насичення $v_{n\Gamma} \approx 1,8 \cdot 10^5$ м/с.

У підсумку поле-швидкісна характеристика для Γ -долини (рис. 3.13), досягнувши максимального значення швидкості $2,1 \cdot 10^5$ м/с, у результаті зміни переважаючого виду розсіювання з полярного оптичного на міждолинне дещо знижується і насичується за $v_{n\Gamma}$. Пікове значення швидкості має, якщо значення напруженості електричного поля трохи менше за 4 кВ/см, яке зазвичай і беруть як критичне поле.

У L-долинах за достатньо високих електронних температур також переважають міждолинні види розсіювання – як в еквівалентні долини (LL-), так і в нееквівалентні (LG-, LX-). Але помітну роль відіграють також акустичне і меншою мірою полярне оптичне розсіювання, тому коефіцієнт непружності визначають, як і в Γ -долині, за виразом (3.29) з поправковим коефіцієнтом 1,2...1,4. Отримане значення $\beta \approx 9$ дає значення швидкості насичення $v_{nL} \approx 1,1 \cdot 10^5$ м/с. Відповідну поле-швидкісну характеристику для електронів L-долини подано на рис. 3.13, а.

У дуже сильних електричних полях не можна обмежитися дводолинним наближенням, адже певна частина електронів перебуває у станах X-долин. Параметри електронів у них забезпечують швидкість насичення $v_{nX} \approx 0,7 \cdot 10^5$ м/с, яку розраховують так само, як і для L-долин.

Середню швидкість електронів знаходять як суму швидкостей в окремих долинах з ваговими коефіцієнтами, що дорівнюють відповідним заселеностям (3.9), які також можна подати функціями напруженості поля, використовуючи попередньо знайдену залежність (3.12) між T_e та \mathcal{E} . На рис. 3.13, б подано

результуючу поле-швидкісну характеристику і внески до неї електронів кожної долини, а також результати (штрихові лінії) від 0 до 10 кВ/см, взяті з праць [5; 57].

Фосфід індію має подібну до GaAs зонну структуру і, відповідно, поле-швидкісну характеристику (рис. 3.14, а). Її нахил у слабкому полі, який визначається рухливістю, дещо менший через більшу ефективну масу в Γ -долині. Але через більшу енергетичну відстань до верхніх долин (0,59 еВ) швидкість досягає більшого максимального значення $2,5 \cdot 10^5$ м/с відповідно за більшого значення критичної напруженості поля, близького до 10 кВ/см. Для порівняння на цьому ж рисунку наведено результати моделювання (суцільні лінії) та експерименту (штрихові та пунктирні лінії) до напруженості 30 кВ/см, взяті з роботи [54].

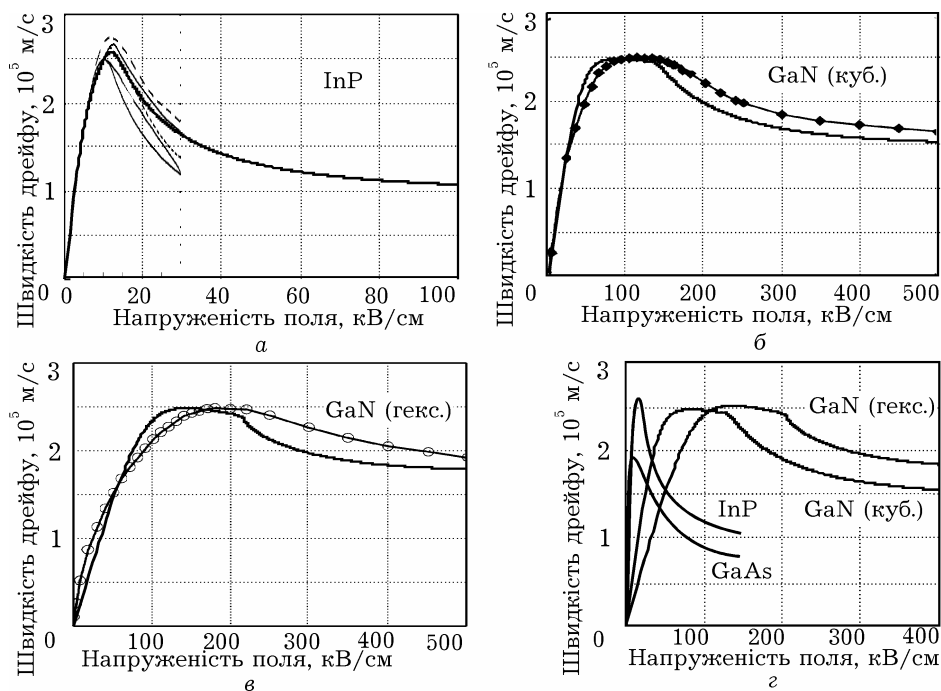


Рис. 3.14. Поле-швидкісні характеристики фосфіду індію (а), нітриду галію з кубічною (б) та гексагональною (в) структурою; для зручності порівняння ці характеристики зведено в однаковому масштабі (г)

Нітрид галію з кубічною кристалічною структурою має ще меншу рухливість у слабкому полі насамперед через більшу ефективну масу. Найістотнішою відмінністю його поле-швидкісної характеристики є те, що перехід до режиму насичення відбувається за значно вищої напруженості електричного поля (близько

100 кВ/см). Крім того, різке спадання дрейфової швидкості, викликане інтенсифікацією переходів у верхні долини, починається за напруженості близько 150 кВ/см, що відповідає міждолинній відстані 1,3 еВ.

Подібні параметри поле-швидкісної характеристики має нітрид галію з гексагональною структурою кристалічної ґратки. Під час розрахунків вважали, що міждолинні переходи відбуваються не тільки з нижньої Γ_1 -долини у верхню Γ_2 -долину (1,9 еВ), але й у ще більш високі ЛМ-долини (2,1 еВ). Хоча ефективні маси в них майже однакові ($m^* \approx m$), за рахунок більшої кількості останніх переважатиме Γ_1 -ЛМ розсіювання. У підсумку інтенсивні міждолинні переходи починаються за ще більших (близько 200 кВ/см) напруженостей, ніж для кубічної структури. На рис. 3.14 б, в для порівняння наведено результати моделювання поле-швидкісних характеристик методом Монте-Карло [58].

Зведені на рис. 3.14, г характеристики вказують на особливості цих матеріалів та на перевагу нітриду галію для використання у приладах підвищеної потужності.

3.3. ДИНАМІЧНА ПРОВІДНІСТЬ

3.3.1. Диференціальна провідність

Статична питома електропровідність визначається як коефіцієнт пропорційності між густиною струму провідності й напруженістю електричного поля: $j = \sigma \mathcal{E}$. Відповідно визначимо динамічну (диференціальну) провідність як коефіцієнт пропорційності між змінами dj та $d\mathcal{E}$: $\sigma_d = dj/d\mathcal{E}$. Оскільки густина струму $j = env$, то за незмінної концентрації $dj = endv$. У слабких електричних полях швидкість дрейфу пропорційна напруженості поля $v = \mu \mathcal{E} = (e\tau_p/m^*)\mathcal{E}$, оскільки ж рухливість постійна, то $dv = \mu d\mathcal{E}$ і диференціальна провідність збігається зі статичною. У сильних полях через особливості оптичного розсіювання відбувається насичення швидкості, зменшується

час релаксації імпульсу i , відповідно, рухливість. За цих умов із стаціонарного рівняння балансу імпульсу випливає, що $(e/m^*)d\mathcal{E} = (\tau_p^{-1})dv + v d(\tau_p^{-1})$. У режимі насичення $dv = 0$ і $d(\tau_p^{-1}) = (e/m^* v_H) d\mathcal{E}$. Якщо цей зворотний зв'язок між рухливістю і напруженістю поля екстраполювати на перехідну область, то $dv = \mu(1 - v/v_H)d\mathcal{E}$ й

$$\sigma_d = \sigma \left(1 - \frac{v}{v_H} \right). \quad (3.31)$$

У слабких полях $v \ll v_H$ і диференціальна провідність збігається зі статичною, але з наближенням до режиму насичення зменшується до нуля. Отримане співвідношення (3.31) придатне для однодолинних напівпровідників (Si, Ge), якщо концентрація електронів у зоні залишається незмінною.

Результати попереднього розділу показують, що характерною ознакою арсеніду галію й інших багатодолинних напівпровідників є наявність спадної ділянки на залежності дрейфової швидкості від напруженості електричного поля. Пояснюється це тим, що з розігріванням збільшується частка електронів, які під час міждолинного розсіювання переходять у верхні долини, де їхня ефективна маса стає більшою. У результаті зменшується середня дрейфова швидкість i , відповідно, струм провідності. Така ситуація приводить до того, що позитивні зміни поля викликають негативні зміни струму провідності в матеріалі, тобто *від'ємну динамічну провідність* (ВДП). Залежності такої провідності від напруженості поля, отримані чисельним диференціюванням функції $v(\mathcal{E})$, зображено на рис. 3.15 (штрихові лінії).

Для аналізу основних факторів, що впливають на значення ВДП, візьмемо до уваги, що струм створюють різні групи електронів, які мають у різних долинах свої характерні параметри, тобто $j = \sum_i en_i v_i = en \sum_i b_i v_i$, і тому $\sigma_d = \sum_i \sigma_{di}$ із підсумовуванням за Γ -, L -, а в разі потреби і за X -долинами. Для кожної долини

$$\sigma_{di} = \frac{en d(b_i v_i)}{d\mathcal{E}} = en \left[\frac{b_i dv_i}{d\mathcal{E}} + \frac{v_i db_i}{d\mathcal{E}} \right], \quad (3.32)$$

де перший доданок можна описати співвідношенням, подібним до (3.31). Для другого доданка, пов'язаного з перезаселенням долин, слід мати на увазі, що заселеності долин $b_i = n_i / n$ залежать від напруженості поля, але не явно, а через електронну температуру, тому

$$db_i = \frac{db_i/dT_e}{d\mathcal{E}/dT_e} d\mathcal{E}. \quad (3.33)$$

Для Γ -долини, використовуючи співвідношення (1.57) та (2.32), можна отримати

$$\frac{db_\Gamma}{dT_e} = -b_\Gamma(1 - b_\Gamma) \frac{\Delta_{\Gamma L}}{k_B T_e^2}. \quad (3.34)$$

Похідну $d\mathcal{E}/dT_e$ можна легко визначити для режиму насичення, за якого і виявляються міждолинні переходи, з умови $d\mathcal{E} = v_n d(\mu^{-1})$. Звідси $d\mathcal{E}/dT_e = v_n d(\mu^{-1})/dT_e$, а оскільки в сильному полі для міждолинного розсіювання можна вважати, що $1/\tau_p \sim T_e$ (див. рис. 3.6, б), то

$$\frac{d\mathcal{E}}{dT_e} \approx \frac{v_n}{\mu T_e}.$$

Отже, для розрахунку диференціальної провідності, зумовленої електронами тільки Γ -долини, можна отримати:

$$\sigma_{d\Gamma} = en\mu_\Gamma b_\Gamma \left[1 - \frac{v_\Gamma}{v_{n\Gamma}} - \frac{v_\Gamma}{v_{n\Gamma}} (1 - b_\Gamma) \frac{\Delta_{\Gamma L}}{k_B T_e} \right]. \quad (3.36)$$

Повна провідність включає подібні вирази для верхньої (верхніх) долини. Для спрощення можна вважати, що в області найбільш різкого спаду результуючої кривої $v(\mathcal{E})$ (рис. 3.13, а) швидкість електронів у верхніх долинах ще не досягає насичення, і їхню рухливість можна вважати постійною і майже на порядок меншою. У підсумку хорошим наближенням може служити вираз

$$\sigma_d = \sigma \left(1 - \frac{v_\Gamma}{v_{n\Gamma}} - \frac{b_\Gamma b_L \Delta_{L\Gamma}}{k_B T_e} \right), \quad (3.37)$$

в якому внесок електронів верхніх долин враховано у сумарній статичній електропровідності σ , а в останній доданок можна ввести поправковий коефіцієнт 0,6...0,8.

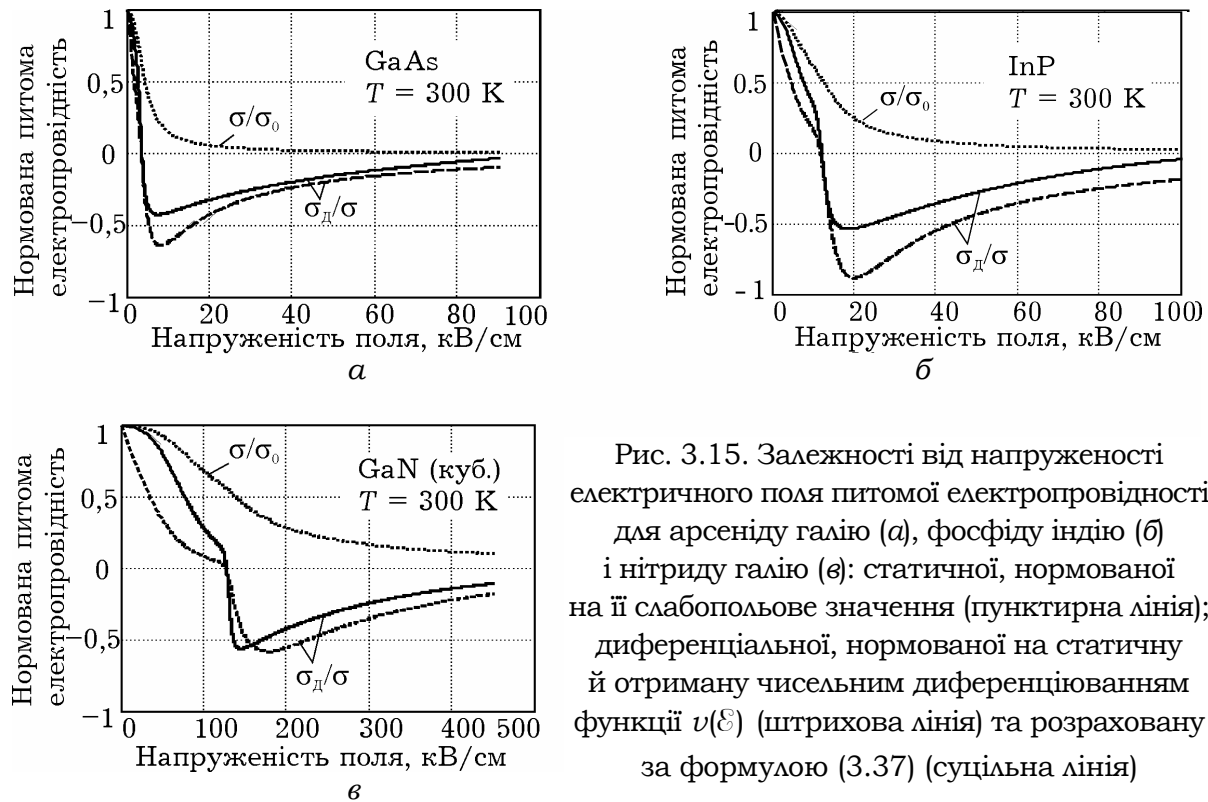


Рис. 3.15. Залежності від напруженості електричного поля питомої електропровідності для арсеніду галію (а), фосфіду індію (б) і нітриду галію (в): статичної, нормованої на її слабкопольове значення (пунктирна лінія); диференціальної, нормованої на статичну й отриману чисельним диференціюванням функції $\nu(\mathcal{E})$ (штрихова лінія) та розраховану за формулою (3.37) (суцільна лінія)

На рис. 3.15 наведено нормовані залежності σ_d/σ від напруженості електричного поля: розраховані за виразом (3.37) й отримані чисельним диференціюванням кривих $\nu(\mathcal{E})$. Найхарактерніша особливість отриманих результатів – наявність області ВДП, що виявляється майже відразу після початку міждолинних переходів ($\mathcal{E} \approx 4$ кВ/см для арсеніду галію, 10 кВ/см для фосфіду індію та біля 120 кВ/см для нітриду галію) і набуває максимального значення, коли концентрації електронів у верхній і нижній долинах приблизно однакові ($b_T b_L \approx 0,25$). Слід звернути увагу на те, що з розглянутих матеріалів найбільше відносне значення ВДП має фосфід індію.

Розрахована таким чином диференціальна провідність придатна лише для повільних змін електричного поля і, відповідно, струму. Із підвищенням швидкості змін (частоти) слід враховувати інерційність таких процесів: запізнювання зіткнень,

що характеризується часом релаксації імпульсу (τ_p), релаксації енергії (τ_E), міждолинних переходів (τ_n), використовуючи для цього нестационарні рівняння збереження.

3.3.2. Високочастотна провідність

Для високочастотних змін електричного поля обмежимося розрахунком малосигнальної провідності. Для цього всі змінні величини $a(t)$ подамо у вигляді суми постійної складової a_0 і гармонічно мінливої в часі з малою амплітудою a_{\sim} : $a(t) = a_0 + a_{\sim}e^{i\omega t}$. Нехтуючи членами другого порядку малості й з огляду на те, що $\partial/\partial t = i\omega$, використовувати рівняння поділимо на незалежні від часу для постійних складових і лінійні рівняння для амплітуд змінних.

Використання такої процедури для густини струму $j = env$ дозволяє отримати для обчислення його високочастотної складової таке співвідношення:

$$j_{\sim} = en_0 v_{\sim} + ev_0 n_{\sim}. \quad (3.38)$$

Звідси видно, що змінна складова струму визначається двома факторами: змінною швидкістю та змінною концентрацією електронів за рахунок міждолинних переходів. Відповідно високочастотна провідність для кожної долини включає два доданки. Обчислюючи v_{\sim} та n_{\sim} як пропорційні змінній амплітуді електричного поля \mathcal{E}_{\sim} , матимемо два характерних доданки для провідності.

Перенесемо детальні розрахунки у дод. ДЗ, а тут наведемо лише їх підсумки. Для першого доданка відповідно до виразу (3.38) результат можна подати в такому вигляді:

$$\sigma_{\omega}^{(1)} = \frac{\sigma_0}{1 + i\omega\tau_{p0}} \left[1 - \frac{v_0}{v_n} \frac{1}{1 + i\omega\tau_{E0}} \right]. \quad (3.39)$$

Якщо вважати, що значення провідності визначається переважно електронами однієї долини, то рівняння (3.39) за $\omega \rightarrow 0$ збігається з формулою (3.37), що описує низькочастотну диференціальну провідність.

Другий доданок, що визначається змінною складовою концентрації електронів, як доповнення до рівняння (3.39) для високочастотної електропровідності

$$\sigma_{\omega}^{(2)} = -\frac{e^2 n_0 \tau_{p0}}{m^*} \frac{v_0}{v_H} \frac{\tau_{E\omega}}{\tau_{E0}} \frac{b_{i0} b_{j0}}{1 + i\omega \tau_M} \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e}. \quad (3.40)$$

Тут введено поняття загального часу міждолинної релаксації через обернені часи релаксації між окремими долинами:

$$\tau_M = \left(\frac{1}{\tau_{ij0}} + \frac{1}{\tau_{ji0}} \right)^{-1}. \quad (3.41)$$

Значення високочастотної електропровідності, нормоване на її статичне значення, можна розрахувати за співвідношенням

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma} = \frac{\tau_{p\omega}}{\tau_{p0}} - \frac{v_{0\Gamma}}{v_{H\Gamma}} \frac{\tau_{E\omega}}{\tau_{E0}} \left(\frac{\tau_{p\omega}}{\tau_{p0}} + \frac{b_{i0} b_{j0}}{1 + i\omega \tau_M} \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right). \quad (3.42)$$

Насамперед зазначимо, що провідність має комплексний характер, який проявляється на високих частотах. Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин електропровідності, нормованої на її статичне значення, $\sigma = e^2 n \tau_{p0} / m^*$, зображено на рис. 3.16.

Частотна залежність σ_{ω} визначається множниками типу $(1 + i\omega\tau)^{-1}$, що включають три часові константи: τ_p , τ_E і τ_M . Перший доданок залежить від частоти зіткнень, тобто від часу релаксації імпульсу, і пояснюється інерційністю змін струму зі зміною поля. Другий доданок пов'язаний з переходом дрейфової швидкості в режим насичення, що вимагає участі оптичних фононів, і можливий тільки у разі підвищення температури електронів. Інерційність процесів розігрівання визначається часом релаксації енергії, тому другий доданок містить ще й τ_E . Для процесів, пов'язаних з перерозподілом електронів по долинах, характерна інерційність як процесів розігрівання, так і міждолинних переходів. Тому в третій доданок входить час τ_E і τ_M (3.41). Важливо зазначити, що він пропорційний енергетичній відстані

Δ_{ij} між долинами і саме він визначає від'ємні значення високо-частотної електропровідності.

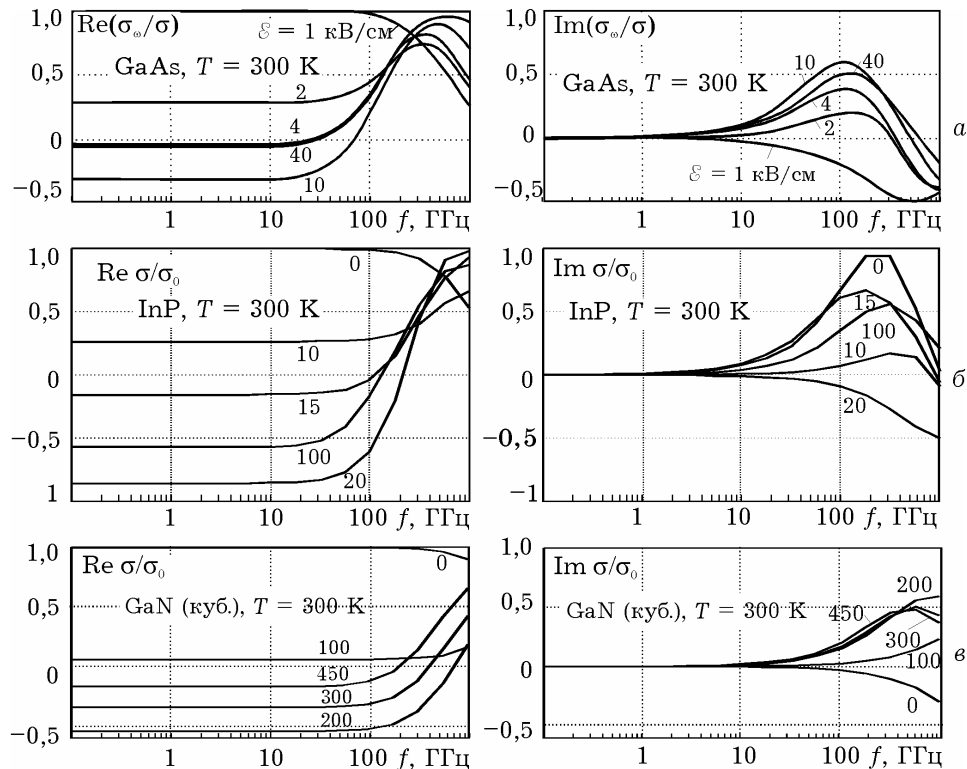


Рис. 3.16. Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної питомої електропровідності, нормованої на її статичне значення для арсеніду галію (а), фосфіду індію (б) та нітриду галію (в)

Із цих трьох видів часу найбільше значення (близько 1 пс для GaAs, трохи менше для InP і близько 0,3 пс для GaN) має τ_E , тому верхня частотна межа ВДП залежить насамперед від інерційності процесів розігрівання електронів і становить десятки (для GaAs) та сотні (для GaN) гігагерців. У слабкому полі (верхні криві на рис. 3.16) процеси розігрівання і міждолинних переходів несуттєві, тому спад провідності визначається значенням τ_p і відбувається на частотах порядку 100 ГГц.

Реактивна провідність виявляється на більш низьких частотах (одиниці або десятки ГГц), що пояснюється особливостями множників $(1 + i\omega\tau)^{-1} = (1 - i\omega\tau)/(1 + \omega^2\tau^2)$: реактивна провідність, на відміну від активної, пропорційна першому степеню $\omega\tau$. У слабкому полі вона має індуктивний характер, але в області ВДП змінює знак разом з активною складовою

і стає ємнісною. Далі, на дуже високих частотах, за час періоду поля міжзонні переходи не встигають відбуватися (високочастотна складова заселеності долин b_{\sim} зменшується) і реактивна провідність знову стає індуктивною. При цьому, оскільки більшість електронів перебуває у верхніх долинах, значення провідності визначається параметрами цих долин.

Урахування струму зміщення $j_{\text{зм}} = i\omega\epsilon\epsilon_0\mathcal{E}$ зумовлює наявність в комплексній провідності σ_{ω} тільки уявної складової $i\omega\epsilon\epsilon_0$, а для нормованої величини σ_{ω}/σ її внесок $\Delta\sigma_{\omega}/\sigma = i\omega\epsilon\epsilon_0/en\mu = i\omega\tau_{\text{мкс}}$. Тут $\tau_{\text{мкс}} = \epsilon\epsilon_0/\sigma$ – максвеллівський час релаксації, який і визначає інерційність процесів, пов'язаних зі струмами зміщення. Його значення може змінюватися в широких межах залежно від концентрації домішки, але для типових значень $N_{\text{д}}$ порядку 10^{23} м^{-3} цей час у сильних електричних полях становить $10^{-1} \dots 10^{-2}$ пс.

Відповідно, вплив струму зміщення помітний лише на частотах у сотні гігагерців. Але вже за концентрацій домішки 10^{21} м^{-3} максвеллівський час релаксації стає більшим, ніж час релаксації енергії, тому інерційність провідності визначатиметься переважно струмами зміщення.

Важливим результатом проведеного аналізу є можливість розрахунку граничної частоти існування ВДП. Його можна провести, знехтувавши інерційністю міждолинних переходів ($\omega\tau_{\text{м}} \ll 1$), запізнюванням зіткнень ($\omega\tau_{\text{р}} \ll 1$) і вважаючи, що в режимі ВДП швидкість електронів досягає насичення ($v_{0\Gamma} = v_{\text{нГ}}$). Тоді формула (3.42) спрощується і набуває вигляду

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma} \approx 1 - \frac{1 - i\omega\tau_{E0}}{1 + \omega^2\tau_{E0}^2} \left(1 + b_{i0}b_{j0} \frac{\Delta_{ji}}{k_{\text{Б}}T_e} \right). \quad (3.43)$$

Звідси з умови $\text{Re } \sigma_{\omega} = 0$, яка і відповідає граничній ситуації, легко отримати

$$\omega_m\tau_{E0} = \sqrt{\frac{b_{i0}b_{j0}\Delta_{ji}}{k_{\text{Б}}T_e}}. \quad (3.44)$$

За напруженості поля, коли заселеності верхньої і нижньої долин однакові й значення ВДП максимальне, останній вираз спрощується і гранична частота

$$f_m = \frac{1}{4\pi\tau_{E0}} \sqrt{\frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e}}. \quad (3.45)$$

Як видно з рис. 3.17, гранична частота, яка визначається здебільшого часом релаксації енергії, має значення порядку сотень і навіть тисяч гігагерців, зменшуючись зі зростанням напруженості електричного поля.

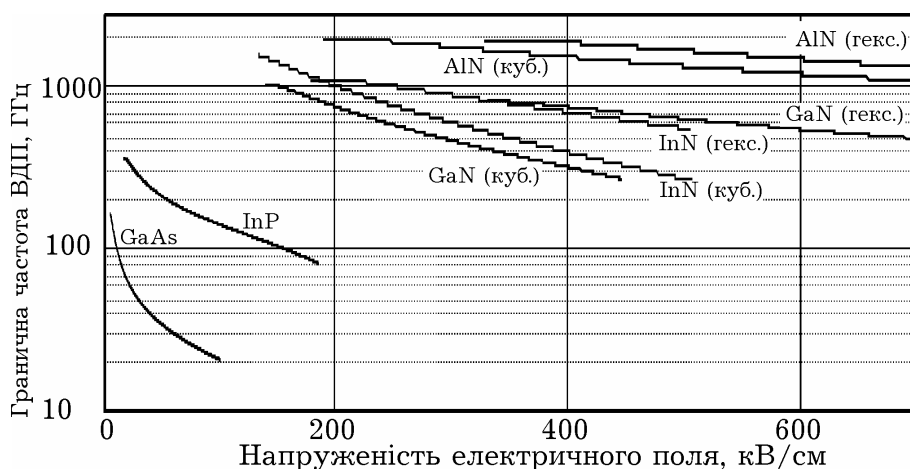


Рис. 3.17. Залежність максимальної частоти існування ВДП для арсеніду галію, фосфіду індію та тринітридів кубічної і гексагональної модифікацій від напруженості електричного поля

Цікава тенденція спостерігається для нітридів з кубічною структурою ґратки – залежності граничної частоти від напруженості електричного поля зсунуті в бік менших значень поля. І хоча для критичних полів граничні частоти для них дещо більші, для режиму найбільшої від'ємної диференціальної провідності ці частоти майже однакові. Варто також зазначити, що тринітриди кубічної модифікації мають більші значення від'ємної динамічної провідності.

Отримані результати для граничної частоти для арсеніду галію та фосфіду індію в цілому відповідають відомим результатам [59], але для нітриду галію суттєво перевищують результати прогнозу, наведені в [60].

3.4. «СПЛЕСК» ДРЕЙФОВОЇ ШВИДКОСТІ

Дрейфові процеси виявляють цікаві особливості в імпульсному електричному полі. У разі стрімкого збільшення напруженості поля значення швидкості дрейфу може в кілька разів перевищувати стаціонарне. Це явище відоме як «сплеск» (*overshoot*) дрейфової швидкості. Характерними є результати чисельного експерименту [5], в якому напруженість поля в GaAs стрибком змінюється в момент часу t_0^+ від значення $\mathcal{E}_1 = 2$ кВ/см до $\mathcal{E}_2 = 40$ кВ/см. Розв'язком (1.57) у цьому разі має бути функція, подібна до (2.40), але з початковою умовою $v(t_0^+) = \mu_1 \mathcal{E}_1$:

$$v(t) = v(t_0^+) + [\mu_2 \mathcal{E}_2 - v(t_0^+)] \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{t - t_0^+}{\tau_p} \right] \right\}. \quad (3.46)$$

Оскільки наведеним значенням напруженості електричного поля за статичною поле-швидкісною характеристикою (рис. 3.13) відповідають приблизно однакові значення швидкості дрейфу (близько $1 \cdot 10^5$ м/с), то перехідного процесу не повинно спостерігатися. Однак чисельне інтегрування повної системи рівнянь збереження імпульсів, енергій і концентрацій у Γ -, L- і X-долинах з розрахунком часів релаксацій на кожному кроці інтегрування дає результати, наведені на рис. 3.18. Найяскравіший з них – це короткочасне збільшення («сплеск») швидкості до значень, що в 6...7 разів перевищують її стаціонарне значення.

Це явище пов'язане з інерційністю процесів розсіювання та із залежністю часів релаксації від напруженості поля. За початкового значення напруженості 2 кВ/см (яке ще можна вважати слабким) електрони розігріваються до температури близько 700 К, якій відповідає час релаксації імпульсу до 0,2 пс й енергії до 1 пс, причому майже всі електрони займають стани Γ -долини. Із увімкненням поля з напруженістю 40 кВ/см параметри руху якийсь час зберігаються попередніми і наростання швидкості можна описати виразом (3.46), але з часом релаксації імпульсу 0,2 пс.

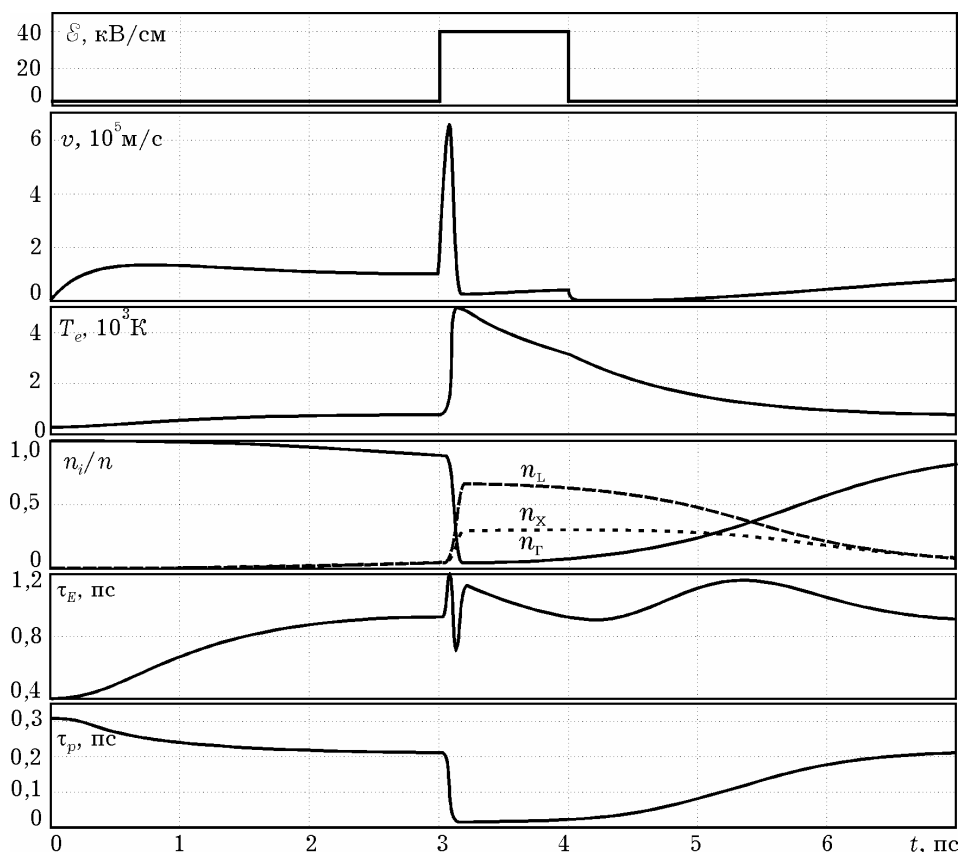


Рис. 3.18. Динамічні (часові) залежності з увімкненням імпульсу електричного поля від 2 до 40 кВ/см для (згори донизу): середньої швидкості дрейфу, електронної температури, заселеності долин, усереднених за долинами часів релаксації енергії та імпульсу

На початковій ділянці прискорення визначають як для вакууму відношенням $e\mathcal{E}_2/m^*$, а швидкість зростає за законом $v(t) = v(t_0^+) + (e/m^*)\mathcal{E}_2(t-t_0^+)$, і за час $\tau_{p1} = 0,2$ пс вона досягла б значення $\mu_1\mathcal{E}_2 \approx 20 \cdot 10^5$ м/с. Тобто у процесі наростання швидкість прямує до значення, що визначається високою рухливістю в слабкому полі \mathcal{E}_1 і великою напруженістю \mathcal{E}_2 .

Однак цього значення швидкість досягти не встигає, тому що одночасно зі зростанням швидкості відбувається подальше розігрівання електронного газу з переважанням майже пружного акустичного й частково полярного оптичного розсіювання. Інерційність такого процесу визначається не стільки процесами релаксації енергії, як цього можна було б очікувати з огляду на співвідношення (2.42), скільки інтенсивною хаотизацією спрямованого руху й розігріванням електронів майже без релаксації

енергії, що формально відображається в переважанні третього доданка в рівнянні (3.5), оскільки $\tau_{E1} > \tau_{p1}$.

Така ситуація приводить також до «сплеску» електронної температури, яка на цьому етапі досягає 5000 К, що майже вдвічі перевищує її стаціонарне значення. Але вже за $T_e \approx 2000$ К «включаються» міждолинні механізми розсіювання і відбувається швидкий перерозподіл електронів по долинах, зростання τ_E до 1,4 пс і зменшення τ_p до значень близько 0,02 пс. Така зміна τ_p викликає стрімке зменшення швидкості дрейфу, причому після різкого спаду швидкість може падати нижче стаціонарного значення для $\mathcal{E}_2 = 40$ кВ/см, а після закінчення імпульсу поля вона може бути навіть від'ємною. Це явище, відоме як *від'ємний «сплеск»* (*undershoot*), пов'язане з різними часами релаксації електронів, які рухаються вздовж поля або назустріч йому. Аналіз такої поведінки електронів не можна провести на основі релаксаційних рівнянь, що використовують усереднені часи релаксації, а лише за допомогою методу Монте-Карло.

Наведене пояснення підтверджують також результати чисельного моделювання перехідних процесів (рис. 3.19) для різних амплітуд імпульсу електричного поля. Зі збільшенням напруженості поля, природно, зростає максимальне значення дрейфової швидкості (рис. 3.19, а). Одночасно з цим спостерігається і «сплеск» електронної температури (рис. 3.19, б), який спричиняє зменшення часу релаксації імпульсу зі збільшенням напруженості поля і відповідно скорочує тривалість «сплеску» швидкості.

Аналогічні процеси відбуваються і в статичному, але просторово неоднорідному електричному полі. Це легко зрозуміти, враховуючи, що в загальному випадку рівняння збереження містять повну похідну за часом від функцій координат і часу: $d/dt = \partial/\partial t + \vec{v} \partial / \partial \vec{r}$. У змінному в часі, але однорідному в просторі полі $\partial / \partial \vec{r} = 0$ й $d/dt = \partial/\partial t$, а в статичному, але просторово змінному полі $d/dt = \vec{v} \partial / \partial \vec{r}$. Тому рівняння і, відповідно, їх розв'язки матимуть подібний вигляд, якщо замінити $x = \int_{t_0}^t v(t') dt'$.

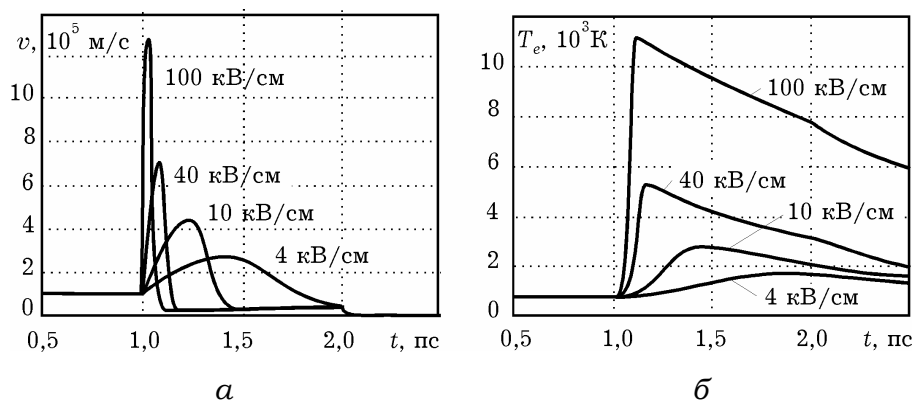


Рис. 3.19. Динамічні залежності дрейфової швидкості (а) та електронної температури (б) для різних значень амплітуди напруженості поля. Тривалість імпульсу поля 1 пс

Проілюструвати це можна рис. 3.20, на якому показано просторову залежність швидкості електронів, що дрейфували в статичному полі з напруженістю $\mathcal{E}_1 = 2$ кВ/см зі швидкістю $v_0 = \mu_1 \mathcal{E}_1$ і влетіли в поле $\mathcal{E}_2 = 40$ кВ/см. Пунктирною лінією на рис. 3.20 показано залежність $v(x) = \sqrt{v_0^2 + 2(e/m^*)\mathcal{E}_2 x}$, що характеризує рух «вільного» (у наближенні ефективної маси) електрона в однорідному полі з початковою швидкістю v_0 без зіткнень ($\tau_p = \infty$). Штрихова лінія відповідає функції

$$\frac{x}{\tau_{p1}} = v_{\text{ст}} \ln \left| \frac{v_{\text{ст}} - v_0}{v_{\text{ст}} - v(x)} \right| + v_0 - v(x), \quad (3.47)$$

що є розв'язком рівняння балансу імпульсу для $\tau_p = \tau_{p1} = \text{const}$. У цьому виразі час релаксації імпульсу відповідає слабкому полю, а $v_{\text{ст}} = \mu_1 \mathcal{E}_2$ – швидкість дрейфу в сталому режимі у полі з напруженістю 40 кВ/см, але з рухливістю μ_1 , такою самою, як і перед вльотом електрона в сильне поле.

Із графіків видно, що після вльоту електрона у простір сильного поля спостерігається *балістичний рух*, тобто рух без розсіювання, подібний до руху у вакуумі. Він триває близько 0,1 пс, за цей час електрон встигає пролетіти відстань у декілька сотих мікрометрів (близько довжини вільного пробігу) і прискоритися до $7 \cdot 10^5$ м/с. Після цього, як і в динамічному випадку, в результаті зіткнень, що починаються, підвищується електронна температура,

що супроводжується переходами електронів у верхні долини й зменшенням часу релаксації майже на порядок. Потім швидкість релаксує до значення, що визначається низьким значенням рухливості в сильному електричному полі.

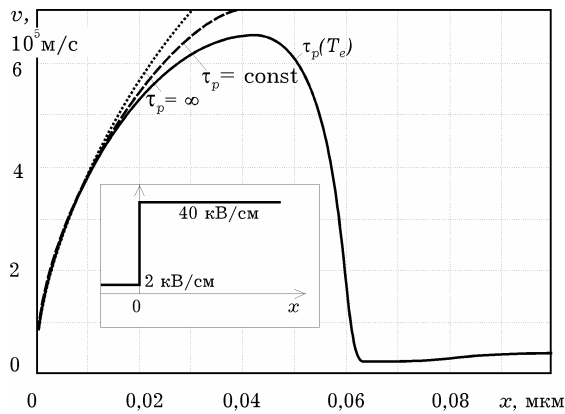


Рис. 3.20. Просторова зміна швидкості електронів, що дрейфували в полі 2 кВ/см і влетіли в поле 40 кВ/см у точці $x = 0$ (пунктирна лінія відповідає балістичному руху без зіткнень, штрихова – руху з тими самими параметрами, що й у слабкому полі)

Результати моделювання ефекту «сплеску» в нітридах алюмінію, галію та індію кубічної і гексагональної модифікацій наведені на рис. 3.21 для стрибкоподібного в часі електричного поля, що змінюється від нульового до фіксованого значення. Для зручності порівняння ці значення, найбільші з яких у 3–5 разів перевищують критичні значення поля, та початкові параметри, окрім енергії фононів, обиралися такими, як

і в роботі [61], де подібне моделювання проводилось методом Монте-Карло.

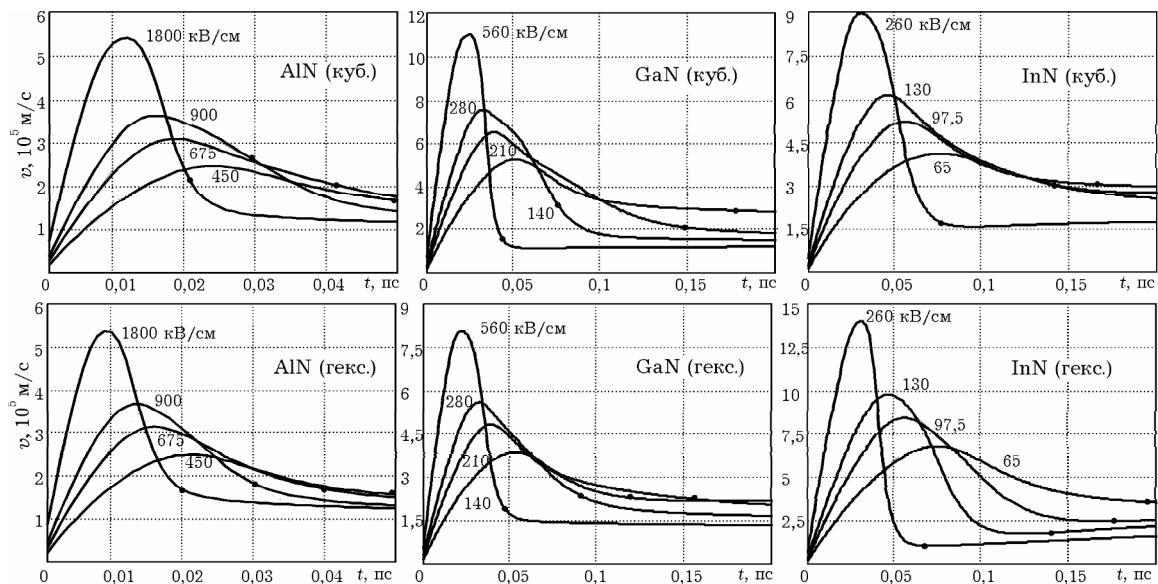


Рис. 3.21. Динамічні залежності швидкості дрейфу для тринітридів за різних значень амплітуди ступінчастого електричного поля (точками позначено моменти часу, що відповідають часу релаксації імпульсу за такої напруженості поля)

Динамічні залежності від часу перераховано в просторовий розподіл швидкості (рис. 3.22). Також на вставках до рис. 3.22 наведено деякі результати з [61] для гексагональних структур.

Звичайно, що пікові значення «сплеску» зростають зі збільшенням напруженості. За найбільших значень поля вони в 4–8 разів перевищують відповідні стаціонарні значення з поле-швидкісної характеристики. Найбільші абсолютні значення швидкості отримано для нітриду індію – близько $15 \cdot 10^5$ м/с за значно меншої, ніж в інших нітридах, напруженості поля. Пояснити це можна тим, що нітрид індію має найбільший час релаксації імпульсу, а саме цей час триває балістичне зростання швидкості. Точки на рис. 3.21 показують, що фактично тривалість імпульсу швидкості, а значить і імпульсу струму, дорівнює часу релаксації імпульсу за такої напруженості електричного поля.

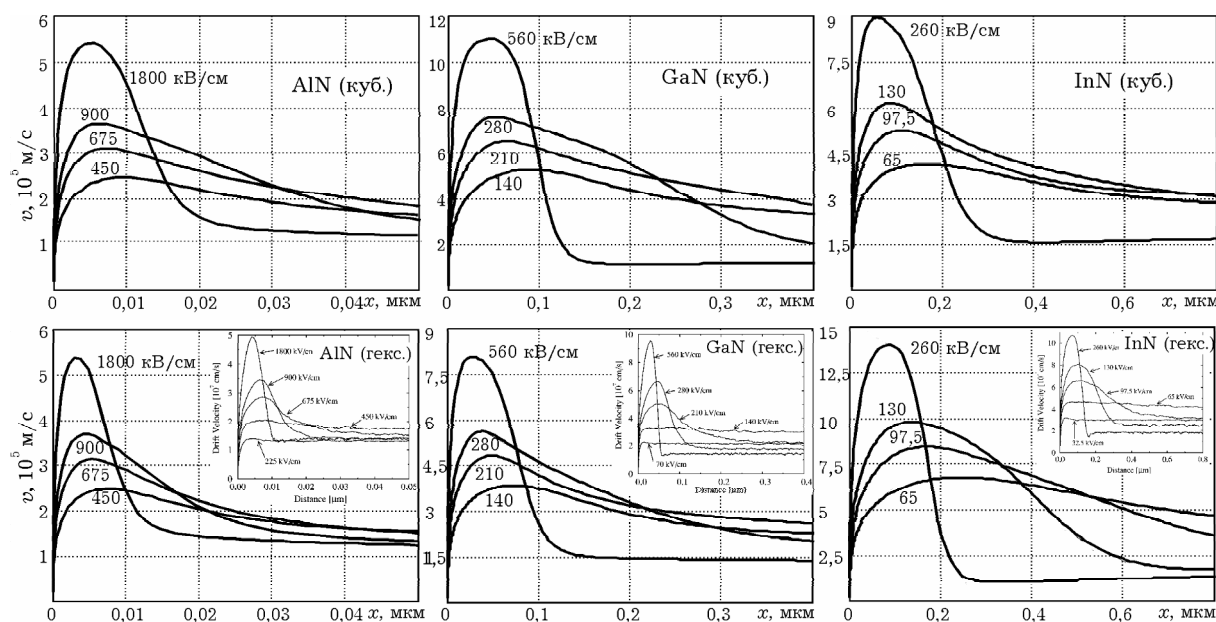


Рис. 3.22. Просторові залежності швидкості дрейфу для тринітридів за різних значень амплітуди ступінчастого електричного поля

Фактично з цієї ж причини довжина «балістичного пробігу» найбільша в нітриді індію (рис. 3.22), порядку 0,1 мкм, тоді як для інших матеріалів вона майже на порядок менша.

Отримані результати добре співвідносяться з результатами, одержаними методом Монте-Карло [61], і свідчать про те, що метод релаксаційних рівнянь придатний для моделювання як

статичних, так і динамічних властивостей напівпровідникових матеріалів, маючи порівняно з методом Монте-Карло більшу часову економічність і достатню інформативність.

Порівняння отриманих залежностей для гексагональних структур нітридів на рис. 3.22 демонструє набагато меншу відмінність результатів, отриманих методом Монте-Карло і методом релаксаційних рівнянь, ніж тих, що показані на рис. 5 в роботі [61]. Очевидно, що причина такої відмінності в некоректності використання авторами [61] рівняння балансу для повної енергії.

Ефект «сплеску» може виявлятися і в тому випадку, коли напруженість поля змінюється у просторі не стрибкоподібно, а порівняно плавно. Він помітний на відстанях близько 0,1 мкм, тому в субмікронних приладах середню швидкість прольоту можна отримати істотно вищою за стаціонарну. Це наочно видно з рис. 4.9, де наведено розподіли швидкості вздовж каналу польового транзистора з довжиною затвора 0,5 та 0,25 мкм. Крім того, цей ефект можна використовувати для отримання надкоротких імпульсів.

3.5. ДИФУЗИЯ ГАРЯЧИХ ЕЛЕКТРОНІВ

З особливостями механізму розігрівання електронів також пов'язана характерна для багатодолинних напівпровідників залежність коефіцієнта дифузії D від напруженості електричного поля (рис. 3.23). Розрахувати її можна, використовуючи співвідношення Ейнштейна: $D = \mu k_B T_e / e$. Враховуючи залежність рухливості від електронної температури та залежність електронної температури від напруженості поля, можна пояснити хід функції $D(\mathcal{E})$: у слабких полях час релаксації імпульсу, а отже й рухливість, майже не залежать від напруженості, тому зростання коефіцієнта дифузії пояснюється тільки підвищенням температури електронного газу; у сильних полях, де переважають оптичне та міждолинне розсіювання, розігрівання не таке значне і коефіцієнт дифузії спадає через зменшення часу релаксації імпульсу і, відповідно, рухливості.

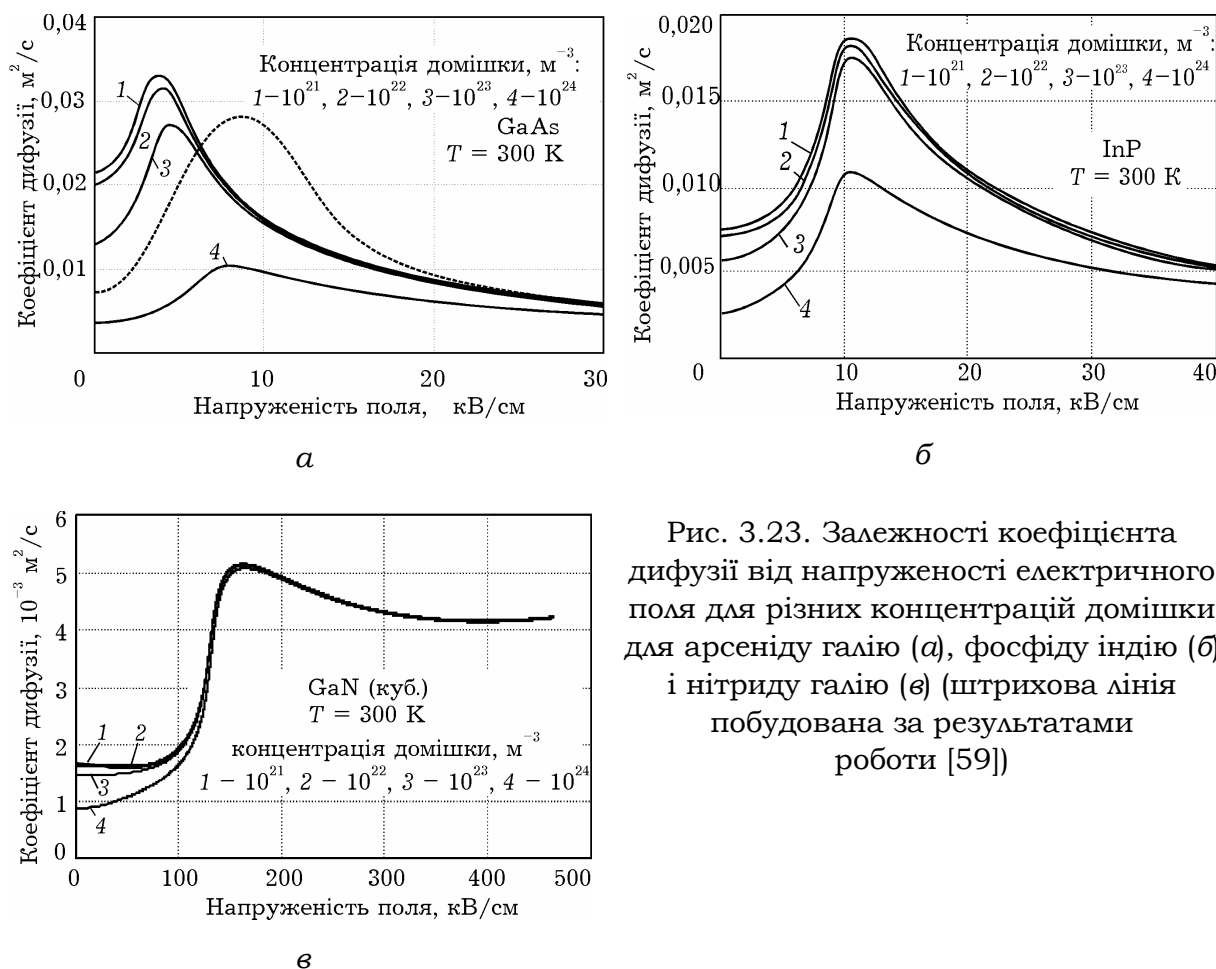


Рис. 3.23. Залежності коефіцієнта дифузії від напруженості електричного поля для різних концентрацій домішки для арсеніду галію (а), фосфіду індію (б) і нітриду галію (в) (штрихова лінія побудована за результатами роботи [59])

Максимальне значення коефіцієнта дифузії має за напруженості поля, близької до критичної. Вплив концентрації домішки практично спостерігається тільки в слабкому полі через збільшення домішкового розсіювання і відповідне зменшення рухливості за більш високого рівня легування.

Пояснити хід залежності коефіцієнта дифузії від напруженості електричного поля для фосфіду індію (рис. 3.21, б) можна тими самими механізмами, що і для арсеніду галію (рис. 3.21, а). Деяко менші значення коефіцієнта дифузії у слабкому полі пов'язані з меншою рухливістю електронів, а положення максимуму відповідає значенню критичної напруженості поля, яке для фосфіду індію становить близько 10 $\text{кВ}/\text{см}$.

Для нітриду галію (рис. 3.21, в) залежність коефіцієнта дифузії від напруженості електричного поля в цілому має подібний вигляд. Майже на порядок менші значення у слабкому полі порівняно з арсенідом галію зумовлені меншими значеннями

рухливості. Відповідно знижені значення і в разі наближення до критичних полів, а в дуже сильних полях коефіцієнт дифузії має практично однакові значення, незважаючи на те, що у нітриді галію електронна температура може досягати суттєво вищих значень.

Слід зазначити, що наявні в науковій літературі [46] експериментальні та теоретичні залежності $D(\mathcal{E})$, загалом маючи однаковий вигляд, різняться між собою як максимальним значенням (до $0,1 \text{ м}^2/\text{с}$), так і положенням максимуму. Це пов'язано, найімовірніше, з різними методами вимірювань та деякою невідомістю умов експерименту (концентрації домішки).

Рекомендована література: [2]; [5]; [46]; [53]; [54]; [55]; [56]; [57]; [58]; [59]; [60]; [61].

4. СУБМІКРОННІ ПОЛЬОВІ ТРАНЗИСТОРИ

4.1. ЗАГАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ

Надвисокочастотні польові транзистори виготовляють зазвичай з арсеніду галію, рідше з фосфіду індію або нітриду галію. Основою структури приладу служить напівізолююча підкладка (рис. 4.1, а), на якій вирощено активний епітаксiальний шар з високою концентрацією донорної домішки, а також тонкий n^+ -контактний шар, нанесений на активний епітаксiальний шар з концентрацією домішки близько $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Такий шар необхідний для формування омичних контактів стоку і виток. Для зменшення їх омичного опору зазвичай використовують сплав Au-Ge-Ni. Товщина активного епітаксiального шару становить від 0,1 до 0,2 мкм за концентрації домішки приблизно $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

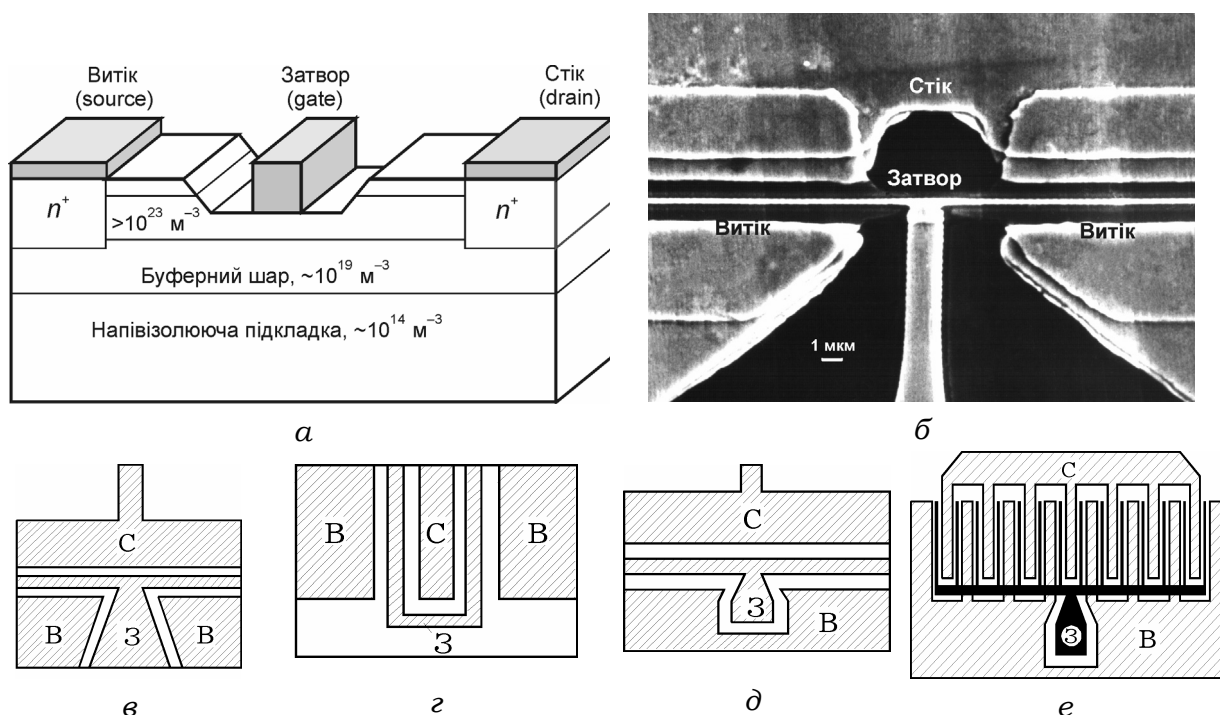


Рис. 4.1. Типова структура (а) і фотографія (б) польового транзистора із затвором у вигляді бар'єра Шоттки та варіанти конструкцій малошумних транзисторів: *Hewlett Packard HP* (США) (в); *Siemens* (ФРН) (г); *NEC* (Японія) (д), а також потужного (е) транзистора

Конструкціями субмікронних ПТШ, вживаними в малошумних підсилювачах, зазвичай є симетричні двосекційні структури. У наш час існує багато конструкцій ПТШ, проте як базові структури можна розглянути структури, зображені на рис. 4.1. Використання тієї чи іншої конструкції пов'язане з вибором узгоджувальних елементів – це можуть бути кола із зосередженими компонентами, а також відрізки ліній передачі. Конкретний тип конструкції транзистора пов'язаний з типом підсилювачів – це можуть бути, наприклад, малопотужні МШП і підсилювачі потужності. У потужних колах використовують багатосекційні транзисторні структури й узгоджувальні кола на відрізках ліній передачі.

Затвор, розміщений між контактами стоку і витоку, утворює з матеріалом напівпровідника бар'єр Шотткі. Метал затвора повинен мати високу провідність, хорошу адгезію до GaAs, високу надійність і не вступати в реакцію з GaAs аж до температур 400 °С. Як матеріал затвора переважає система тугоплавких металів, таких як Ti-Ta-Mo-Au. Бар'єр Шотткі на затворі може бути також виконаний з тугоплавкого матеріалу Mo або W з нанесеним зверху шаром золота, потрібним для монтажу виводів. У пластині в поверхневому n -шарі витравлюється поглиблення до потрібної напруги відсічення і струму стоку насичення, в якому згодом формується субмікронний затвор. Поглиблення затвора в структурі з n^+ -контактним епітаксіальним шаром показано на рис. 4.1. Якщо навіть на поверхні немає n^+ -контактного шару, поглиблення затвора за його достатньої глибини необхідне як для зменшення опору витоку, так і для більш ефективного керування струмом транзистора.

Контактна різниця потенціалів бар'єра разом з прикладеною зовнішньою напругою, від'ємною по відношенню до витоку потенціалом зміщення (транзистор зазвичай вмикається за схемою зі спільним витоком), створюють під затвором збіднену область, що формує провідний канал для електронів між стоком і витоком. Товщина збідненої області в наближенні її

чіткої межі залежить від різниці потенціалів затвора V_{gs} (з урахуванням контактної різниці на бар'єрі Шотткі V_b) і потенціалом каналу $V(x)$, що збільшується від витoku до стоку і визначається відомим співвідношенням

$$d(x) = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0[V(x) + V_b - V_{gs}]}{eN_d}}. \quad (4.1)$$

Зміни потенціалу затвора зумовлюють модуляцію товщини каналу і відповідно керування струмом стоку. У певному наближенні канал можна розглядати як нелінійний резистор, керований потенціалом затвора. Стокові характеристики польового транзистора за малої напруги стоку близькі до лінійних і добре описуються такою «резистивною» моделлю керування. У разі великої напруги стоку зі звуженням каналу напруженість електричного поля зростає до таких значень, за яких спостерігається насичення дрейфової швидкості електронів, що викликає зменшення нахилу стокових характеристик або «насичення» струму стоку.

Проста аналітична теорія польових транзисторів, створена Шоклі [62], ґрунтується на наближенні «плавного каналу», що передбачає повільну зміну товщини збідненої області й відповідно наявність у каналі тільки поздовжнього електричного поля. З моделі Шоклі можна вивести таку залежність струму стоку I_d від напруги стоку V_{ds} , напруги затвора і фізико-топологічних параметрів транзистора:

$$I_d = G_0 \left\{ V_{ds} - \frac{2}{3} \frac{[(V_{ds} + V_b - V_{gs})^{3/2} - (V_b - V_{gs})^{3/2}]}{V_p^{1/2}} \right\}, \quad (4.2)$$

де параметр $G_0 = e\mu N_d W a / L$ відповідає провідності необхідного каналу завтовшки a , завширшки W і завдовжки L з концентрацією електронів N_d , а V_p – потенціал перекриття, рівний потенціалу затвора, за якого товщина збідненої області біля витoku стає рівною товщині епітаксiального шару a :

$$V_p = -\frac{eN_d a^2}{2\epsilon\epsilon_0} - V_b. \quad (4.3)$$

Функція (4.2) справедлива до значення напруги стоку, за якого товщина збідненої області у стоковій частині стає рівною a і канал «перекривається», а напруженість поля досягає значень, вищих за критичне, і швидкість електронів насичується. Після цього значення струму зі збільшенням напруги стоку залишається незмінним (рис. 4.2) і рівним струму насичення:

$$I_{dH} = G_0 \left\{ \frac{1}{3} - V_p - \frac{2}{3} \frac{(V_b - V_{gs})^{3/2}}{V_p^{1/2}} - V_b + V_{gs} \right\}. \quad (4.4)$$

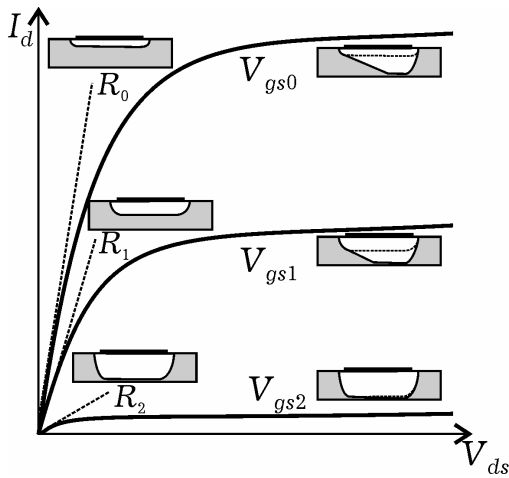


Рис. 4.2. Зміна форми каналу за різної напруги затвора і стоку

Модель Шоклі у вигляді функцій (4.2) та (4.4) придатна для довгоканальних транзисторів, у яких довжина затвора становить мікрометри, що значно більше від товщини епітаксiального шару. Крім того, вона передбачає, що швидкість дрейфу визначається локальним значенням напруженості електричного поля, але зменшення довжини затвора, необхідне

для підвищення робочих частот, робить припущення цієї моделі некоректними. Це можна проілюструвати на прикладі стокових характеристик транзистора – укорочення затвора до субмікронних розмірів якісно змінює їх вигляд (рис. 4.3)

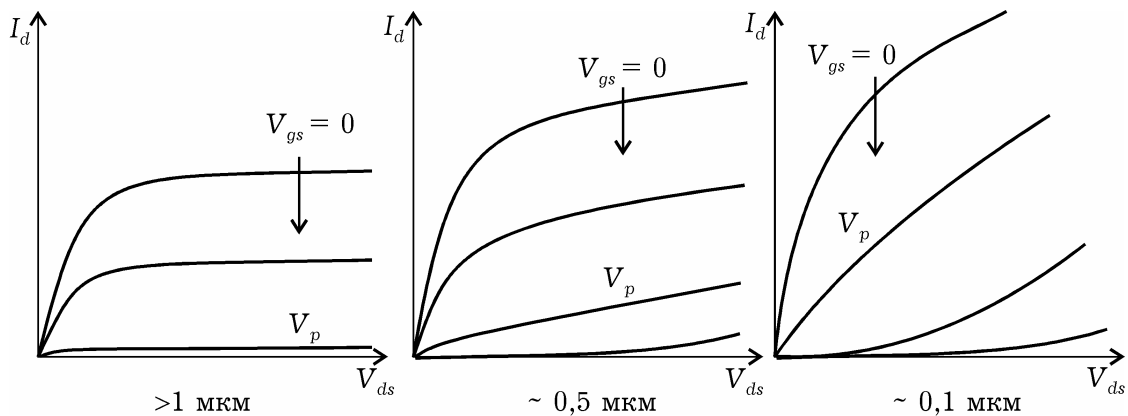


Рис. 4.3. Трансформація форми стокових характеристик зі зменшенням довжини затвора

Для субмікронних довжин затвора на ВАХ не спостерігається насичення – вихідна провідність стає значною і тим вищою, чим менша довжина затвора. Якщо ж потенціал затвора близький до потенціалу перекриття, стокова характеристика близька до лінійної, а її нахил, що визначає вихідну провідність $G_d = \partial I_d / \partial V_{ds}$, приблизно дорівнює нахилу інших ВАХ у режимі «насичення», крім того, її вигляд близький до омічного. Таку ситуацію можна умовно подати як паралельне з'єднання провідності каналу звичайного транзистора і деякої шунтуючої провідності. Кількісні оцінки показують, що таку провідність можуть забезпечити електрони збагаченого шару, що утворюється біля межі епітаксіального шару і підкладки (буферного шару).

Підтвердженням такої моделі можуть служити результати моделювання транзистора методом Монте-Карло [63]. Потенціальний рельєф і просторовий розподіл електронів у каналі відкритого транзистора зображено на рис. 4.4. Видно, що значна частина електронів перебуває поза межами епітаксіального шару, створюючи струм, паралельний струму каналу.

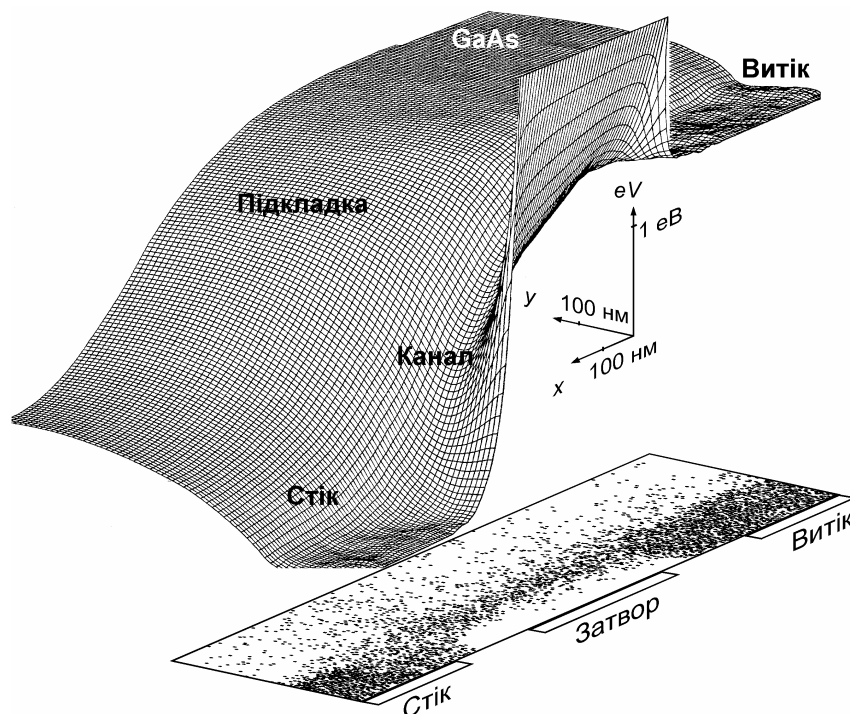


Рис. 4.4. Потенціальний рельєф і розподіл електронів у каналі відкритого ПТШ

Зазначимо, що умови дрейфового руху електронів у каналі й підкладці істотно різні. Переходячи в підкладку біля витоку за рахунок хаотичної швидкості, електрони утворюють контактний потенціальний бар'єр, висота якого (трохи більша за 0,1 еВ) визначається температурою і відношенням між концентраціями домішки в епітаксiальному шарі й підкладці. З розподілу електронів на рис. 4.4 видно також, що у стоковій частині під затвором концентрація електронів у підкладці значно вища. Це відбувається за рахунок розігрівання електронів у каналі (розподіл електронів між долинами див. на рис. 1.3) і підвищення їх електронної температури. У результаті контактний потенціальний бар'єр істотно підвищується і може досягати значень більше 1 еВ. У результаті з розподілу потенціального рельєфу наочно видно, що поздовжнє електричне поле в підкладці слабше, ніж у каналі, що створює різні умови для протікання струму через канал і підкладку.

Ще одна специфічна особливість приладів із субмікронними розмірами пов'язана з релаксаційними процесами. Час релаксації деяких процесів співмірний з часом прольоту електронів у каналі. Відповідно довжини релаксації можуть становити соті й десятки частки мікрометрів, що робить непридатною локальну модель дрейфу, за якої швидкість дрейфу визначається поточним значенням напруженості електричного поля, $-v = \mu \mathcal{E}$. За цих умов потрібно використовувати кінетичне рівняння Больцмана або релаксаційні рівняння збереження імпульсу, енергії й концентрації, описані в першому розділі.

4.2. КВАЗІДВОВИМІРНА МОДЕЛЬ ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА ШОТТКІ

У моделі ПТШ використовують звичайні для моделей такого рівня припущення про чітку межу збідненої області й про відсутність поперечної складової електричного поля в каналі. Такі припущення дозволяють використовувати як початкові одновимірні рівняння Пуассона і рівняння неперервності

струму в такій формі (вісь x направлена уздовж каналу від витоку до стоку):

$$\frac{d\mathcal{E}}{dx} = \frac{e[n(x) - N_d]}{\varepsilon\varepsilon_0}; \quad (4.5)$$

$$I = en(x)v(x)h(x)W, \quad (4.6)$$

а товщину збідненої області $d(x)$ розраховувати залежно від потенціалу $V(x)$ щодо витоку:

$$d(x) = \left\{ \frac{2\varepsilon\varepsilon_0[V_b - V_{gs} + V(x)]}{eN_d} \right\}^{1/2}. \quad (4.7)$$

У співвідношеннях e , $n(x)$, $v(x)$ – заряд, концентрація і швидкість електронів; $h(x)$ – товщина провідного каналу; W – ширина затвора; N_d – концентрація донорної домішки в епітаксiальному шарі; $\varepsilon\varepsilon_0$ – діелектрична проникність GaAs; V_{gs} – напруга зміщення на затворі відносно витоку; V_b – висота бар'єра Шотткі; $V(x)$ – змінний потенціал каналу, що визначає поздовжню напруженість електричного поля:

$$\mathcal{E}(x) = \frac{dV(x)}{dx}. \quad (4.8)$$

Нестационарна динаміка носіїв може бути проаналізована за допомогою рівнянь релаксацій для імпульсу $p = m^*v$ й енергії E :

$$\frac{dp}{dt} = e\mathcal{E} - \frac{p}{\tau_p}; \quad (4.9)$$

$$\frac{dE}{dt} = e\mathcal{E}v - \frac{(E - E_0)}{\tau_E}. \quad (4.10)$$

Залежні від енергії часи релаксації $\tau_p(E)$ і $\tau_E(E)$ можуть бути знайдені методами, описаними у розд. 2. У ранніх роботах вони визначалися з поле-швидкісних і поле-температурних характеристик з умови стаціонарності ($d/dt = 0$): $\tau_p = p_c / e\mathcal{E}_c$; $\tau_E = (E - E_0) / e\mathcal{E}_c v_c$, де індексом «с» позначено стаціонарні значення змінних, а E_0 відповідає рівноважній енергії електронів. Експериментальні й теоретичні стаціонарні

залежності $\tau_p(E)$, $\tau_E(E)$ наведені в роботах [64; 65]. Слід зазначити, що ці розрахунки з різним ступенем точності описують експериментальні характеристики.

Підставляючи в рівняння (4.9) та (4.10) час релаксації τ_p і τ_E , замінюючи в них $dt = dx/v$, отримаємо:

$$\frac{d(m^* v)}{dx} = e \left(\frac{\mathcal{E}}{v} - \frac{\mathcal{E}_c}{v_c} \right); \quad (4.11)$$

$$\frac{dE}{dx} = e \left(\mathcal{E} - \frac{\mathcal{E}_c v_c}{v} \right), \quad (4.12)$$

що є початковими для аналізу нестационарних ефектів у цій моделі. Для повноти в систему рівнянь (27)–(28) слід включити вираз для розрахунку товщини провідного каналу.

Основною відмінністю цієї моделі від описаних у роботах [27; 28], окрім процедури розрахунку, є врахування шунтувального впливу підкладки, який, як показує аналіз моделей, що використовують метод частинок (Монте-Карло), може бути велими істотним. Це пояснюється тим, що на межі епітаксialного шару з підкладкою виникає контактне електричне поле, яке викликає в ній режим збагачення, що приводить до збільшення ефективної товщини провідного каналу.

Аналізуючи вплив підкладки на ВАХ транзистора, слід враховувати два чинники.

Перший з них полягає в тому, що на межі «епітаксialний шар–підкладка» через різні концентрації носіїв виникає контактна різниця потенціалів, яка визначається співвідношенням концентрацій у різних шарах:

$$V_k = \left(\frac{k_B T}{e} \right) \ln \left(\frac{N_d}{N_{dp}} \right). \quad (4.13)$$

Контактне поле утворене переміщенням (дифузцією) рухливих носіїв з активного шару в підкладку. Перехідний шар через зазвичай велику відмінність у концентраціях домішки розміщується переважно в підкладці та є збагаченим шаром. Відповідні

графіки розподілу потенціалу, напруженості поперечного електричного поля і концентрації носіїв за глибиною подано на рис. 4.5. Цей збагачений шар безпосередньо примикає до провідного каналу і збільшує його ефективну товщину.

Другий чинник, який у багатьох випадках слід враховувати, полягає в тому, що глибші шари підкладки, що не потрапляють в область сильного прискорювального поля, мають суто омичну провідність через скінченну концентрацію носіїв. У результаті підкладка шунтує нелінійну провідність каналу і може помітно впливати на ВАХ транзистора.

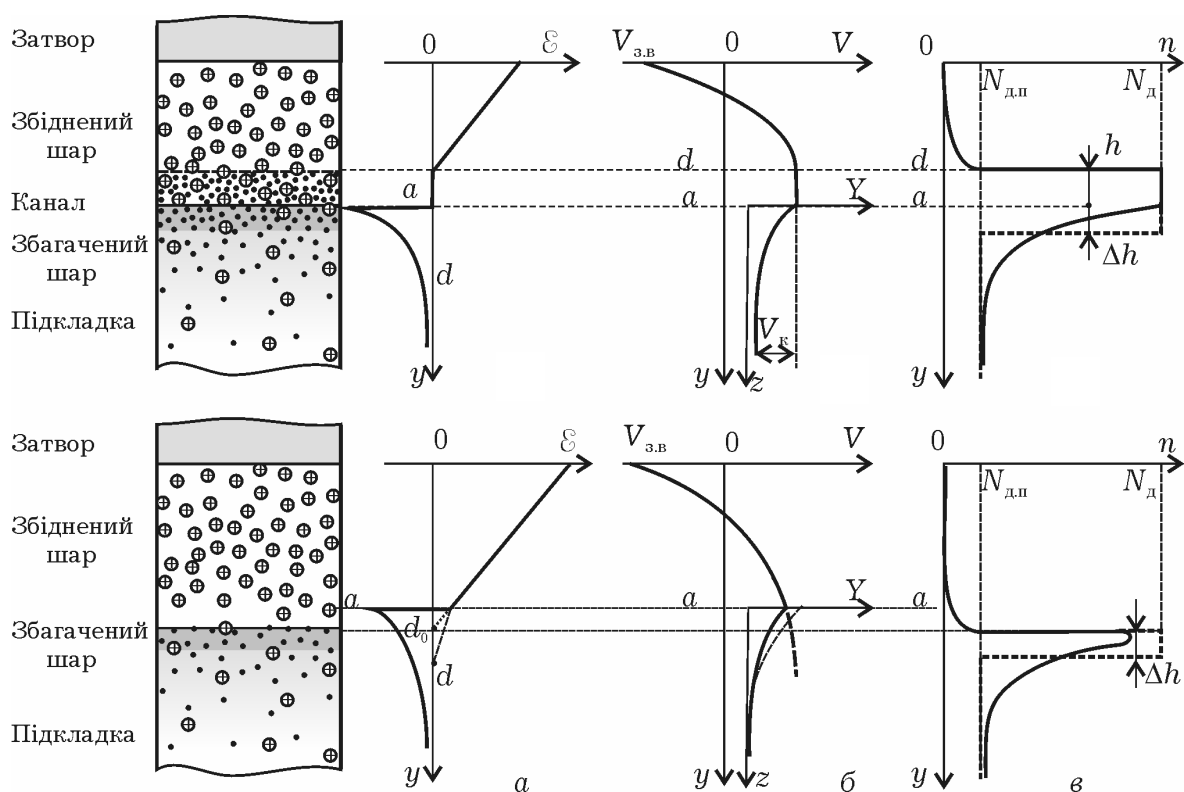


Рис. 4.5. Розподіл напруженості поперечного електричного поля (а), потенціалу (б) і концентрації електронів (в) для неперекритого каналу (верхній ряд) і перекритого (нижній ряд)

Кількісний аналіз цих явищ можливий лише на основі розв'язку двовимірного рівняння Пуассона, проте наближене оцінювання параметрів збагаченого шару можна провести за допомогою одновимірного аналізу. Вибираючи напрям осі y від поверхні углиб підкладки і пов'язуючи розподіл потенціалу $V(y)$ з розподілом рівноважної концентрації $n(y)$ електронів

у підкладці співвідношенням $n(y) = N_{\text{д.п}} \exp[eV(y) / kT]$, запишемо рівняння Пуассона:

$$\frac{d^2 V}{dy^2} = -\frac{\rho(y)}{\varepsilon \varepsilon_0} = \frac{e N_{\text{д.п}} [\exp(eV(y) / k_B T) - 1]}{\varepsilon \varepsilon_0}. \quad (4.14)$$

Вводячи локальні (рис. 4.5) нормовані координати $Y = eV/kT$ і $z = y/l_{\text{е.п}}$, де $l_{\text{е.п}} = \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 k_B T / e^2 N_{\text{д.п}}}$ – дебаївська довжина екранування для підкладки, з рівняння (4.14) отримаємо

$$\frac{d^2 Y}{dz^2} = e^Y - 1. \quad (4.15)$$

Проінтегрувавши рівняння (4.15) за умови, що в глибині підкладки $Y \rightarrow 0$ і $dY/dz \rightarrow 0$, отримаємо вираз

$$\frac{dY}{dz} = -\sqrt{2(e^Y - Y - 1)}. \quad (4.16)$$

Вибраний перед коренем знак відповідає напрямку електричного поля. Подальше аналітичне інтегрування цього рівняння досить складне, проте щоб знайти провідність підкладки можна не звертати уваги на розподіл потенціалу і концентрацію носіїв. Так, наприклад, весь надлишковий електронний заряд, сконцентрований у шарі від y_1 до y_2 під одиничною площадкою на межі поділу «епітаксіальний шар–підкладка», може бути знайдений інтегруванням:

$$\begin{aligned} \Delta Q_1(\Delta y) &= -\int_{y_1}^{y_2} \rho(y) dy = \varepsilon \varepsilon_0 \int_{y_1}^{y_2} \left(\frac{d^2 V}{dy^2} \right) dy = \varepsilon \varepsilon_0 \int_{y_1}^{y_2} d \left(\frac{dV}{dy} \right) = \\ &= \left(\frac{\varepsilon \varepsilon_0 k_B T}{e l_{\text{е.п}}} \right) \left(\frac{dY}{dz} \Big|_{y_2} - \frac{dY}{dz} \Big|_{y_1} \right). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Повний заряд збагаченого шару Q_1 може бути знайдений з виразу (4.17) якщо межами інтегрування обрати $y_1 = a$ та $y_2 \rightarrow \infty$. Оскільки у глибині підкладки $dY/dz \rightarrow 0$, а на поверхні $dY(0)/dz = \sqrt{2(e^{Y_{\text{к}}} - Y_{\text{к}} - 1)}$ та $Y(0) = Y_{\text{к}} = \ln(N_{\text{д}} / N_{\text{д.п}})$, то

$$Q_1 = e N_{\text{д.п}} l_{\text{е.п}} \sqrt{2(e^{Y_{\text{к}}} - Y_{\text{к}} - 1)}. \quad (4.18)$$

Якщо спрощено вважати, що весь заряд (4.18) рівномірно з концентрацією N_d розподілений у деякому шарі завтовшки Δh_1 , то

$$\Delta h_1 = \frac{Q_1}{e N_d} = l_{e.п} \sqrt{2(e^{Y_k} - Y_k - 1)} \left(\frac{N_{d.п}}{N_d} \right). \quad (4.19)$$

Такі оцінки дають підставу вважати, що ефективна товщина каналу збільшується на величину Δh_1 . Проте ця оцінка придатна лише для неперекритого каналу, коли $d < a$. Якщо ж поперечне поле затвора, що забезпечує режим збіднення, проникає в підкладку, товщина збідненого шару може бути розрахована за формулою

$$d = \sqrt{\frac{a^2 + (d_0^2 - a^2) N_d}{N_{d.п}}}, \quad (4.20)$$

де величина d_0 є товщиною збідненого шару в однорідному середовищі з концентрацією N_d , яку знаходять за формулою (4.7). Вираз (4.20) нескладно отримати, розв'язуючи одновимірне рівняння Пуассона для режиму збіднення. З нього ж випливає і вираз для розподілу поперечного поля затвора у підкладці:

$$\frac{dV}{dy} = \frac{e N_{d.п} (d - y)}{\epsilon \epsilon_0}. \quad (4.21)$$

Оскільки результуюче поле можна подати у вигляді суми поля затвора (4.21) і контактного поля (4.16), то виконавши процедуру, подібну до попередньої, можна вважати, що весь заряд у режимі перекриття каналу розподілений рівномірно з концентрацією N_d в еквівалентному шарі:

$$\Delta h_2 = \frac{\Delta h_1 - (d - a) N_{d.п}}{N_d}. \quad (4.22)$$

Розрахувати товщину провідної частини каналу можна з урахуванням схеми (рис. 4.6), що пояснює визначення форми збідненої області під затвором і товщини каналу для різних ділянок активної області транзистора.

Із цієї схеми зрозуміло, що в основній частині під затвором, де $d < a$, товщина каналу є змінною величиною:

$$h(x) = a - d(x) + \Delta h_1. \quad (4.23)$$

Якщо під стоковою частиною затвора виникає перекриття ($d > a$), то

$$h(x) = \Delta h_2(x). \quad (4.24)$$

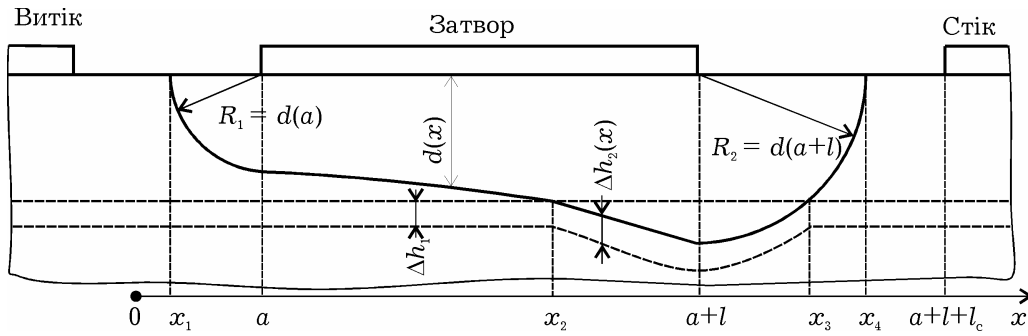


Рис. 4.6. Схема розрахунку форми збідненої області під затвором і товщини провідного каналу

Зазначимо, що і в цьому випадку товщина каналу — змінна, оскільки величина d , що входить у вирази (4.22) та (4.23), залежить від змінного потенціалу каналу відповідно до співвідношення (4.1).

Крайові ефекти, що виникають біля кінців затвора, можуть бути враховані апроксимуючими дугами кіл для збідненої області. Біля витокового краю затвора радіус дуги дорівнює товщині збідненої області біля початку затвора і для його знаходження треба заздалегідь розрахувати потенціал каналу $V(a) = IR_{gs}$. Радіус дуги біля стокового кінця затвора дорівнює товщині збідненої області біля краю затвора і в цій моделі його знаходять у процесі обчислень. Треба мати на увазі, що в цій області (точка x_3 на рис. 4.6) треба Δh_2 замінити на Δh_1 .

За межею збідненої області ($x < x_1$ і $x > x_4$) канал повністю відкритий і

$$h = a + \Delta h_1. \quad (4.25)$$

Слід також зазначити, що вибір еквівалентних шарів, які збільшують ефективну товщину каналу, не зовсім коректний. Це пояснюється тим, що верхня частина збагаченого шару

перебуває в області сильного поля стоку і лише її потрібно враховувати в розрахунках ефективної товщини каналу. Нижня частина збагаченого шару найчастіше перебуває в області слабкого поля і ці електрони створюють омічну шунтувальну провідність підкладки, проте чітких критеріїв для такого розділення у межах цієї одновимірної моделі немає.

Для чисельного розв'язку системи рівнянь (4.5)–(4.12) канал розбивається на ділянки завдовжки Δx , тож похідні обчислюються через скінченні прирости. Вихідні рівняння в цьому випадку можуть бути записані для i -ї точки у такому вигляді:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_i &= \mathcal{E}_{i-1} - \frac{e\Delta x(n_i - N_d)}{\varepsilon\varepsilon_0}; \\ I &= en_i v_i h_i W; \\ V_i &= V_{i-1} + \mathcal{E}_i \Delta x; \\ m_i^* v_i &= m_{i-1}^* v_{i-1} + e\Delta x \left(\frac{\mathcal{E}_i}{v_i} - \frac{\mathcal{E}_{ci}}{v_{ci}} \right); \\ E_i &= E_{i-1} + e\Delta x \left(\frac{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_{ci} v_{ci}}{v_i} \right); \\ h_i &= a - d_i + \Delta h_i.\end{aligned}$$

Стаціонарні значення величин v_{ci} , \mathcal{E}_{ci} і значення ефективної маси $m_i^*(E)$ можуть бути знайдені за значеннями енергій E_{i-1} з використанням функцій $\mathcal{E}_c(E)$, $v_c(E)$ та $m^*(E)$, розрахованих методом Монте-Карло і наведених, наприклад, у роботі [66].

Результати обчислення форми збідненої області під затвором, розподіл швидкості електронів, потенціалу та енергії, концентрації носіїв і напруженості електричного поля уздовж каналу транзистора за довжини затвора $L = 0,5$ мкм, ширини затвора $W = 200$ мкм, товщини епітаксialного шару $a = 0,15$ мкм, концентрації донорів у каналі $N_d = 10^{17}$ см⁻³ і підкладці $N_{дп} = 5 \cdot 10^{14}$ см⁻³, напруги на затворі $V_{gs} = 0$ В, струму стоку 30 мА подано на рис. 4.7.

З рисунка видно, що швидкість не «відслідковує» зміни напруженості поля відповідно до статичної поле-швидкісної характеристики. Просторовий прояв ефекту «сплеску» приводить до помітного перевищення миттєвої дрейфової швидкості під затвором над її стаціонарними значеннями, що зменшує час прольоту електронів у каналі й підвищує швидкодію приладу. Зменшення швидкості біля стокового краю затвора пов'язане з інтенсивним збільшенням ефективної маси електронів, викликаного їх розігріванням у сильному електричному полі й переходом до верхньої долини. Це приводить і до утворення статичного домена з істотним перепадом концентрації носіїв. Область існування домена виходить зі стокової частини каналу досить далеко в омичну область. Зазначимо, що енергія електронів залишається помітно вищою за рівноважну і поза областю домена. Повне охолодження електронного потоку відбувається на відстані близько 0,3...0,5 мкм. Ця особливість важлива як із погляду моделювання шумів у каналі, так і у зв'язку з вибором відстані «затвор-стік» при проектуванні приладу.

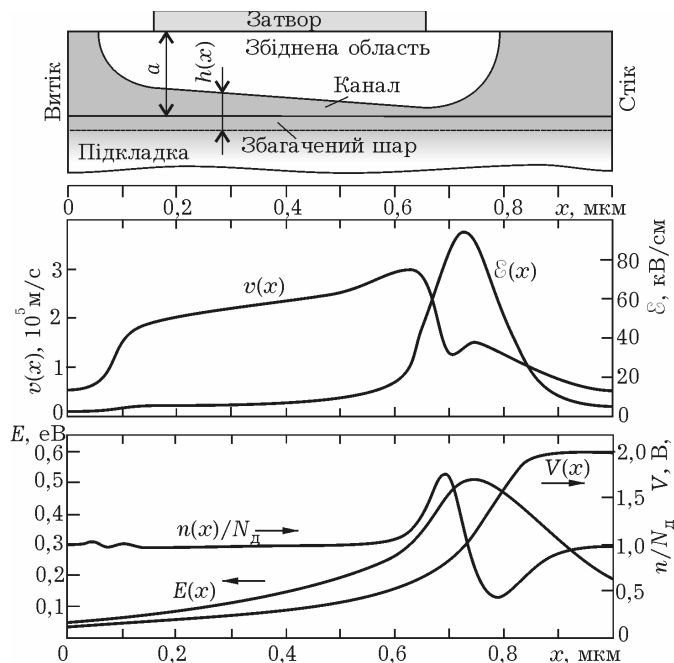


Рис. 4.7. Результати обчислення форми збідненої області під затвором, розподілу швидкості електронів, потенціалу й енергії, концентрації носіїв і напруженості поля уздовж каналу транзистора

Квазидвовимірна модель добре описує збільшення вихідної провідності, тобто нахил стокової характеристики у транзисторах з довжиною затвора близько 0,5 мкм, але неадекватно відображає деякі більш тонкі явища, зокрема залежність цієї провідності від напруги затвора. Для цього слід враховувати, по-перше, різні умови руху електронів у підкладці й каналі

транзистора і, по-друге, взяти до уваги, що наближення плавного каналу втрачає силу для довжин затвора $0,2...0,3$ мкм.

Опис нестационарного дрейфу в таких структурах також можливий на основі систем рівнянь (4.5)–(4.12), але записаних для каналу і підкладки. Окрім рівнянь неперервності, Пуассона, рівнянь збереження імпульсу та енергії, система рівнянь повинна містити рівняння зв'язку, що описують процеси перерозподілу носіїв між каналом і підкладкою в широкому діапазоні живильної напруги, зокрема субпороговий режим [67] і режим відкритого каналу [68].

Слід взяти до уваги, що температура електронів під затвором може істотно відрізнитися від рівноважної унаслідок розігрівання і міждолинних переходів. При цьому «повільні» електрони верхніх долин зменшують середню дрейфову швидкість колективного руху, що приводить до процесів накопичення носіїв в області сильного електричного поля під затвором. У роботах [29; 69] у межах квазідвовимірної фізикотопологічної моделі розглядають дифузійний механізм інжекції гарячих носіїв з каналу в підкладку. На межі епітаксialного шару з підкладкою є потенціальний бар'єр, зумовлений контактом напівпровідників з різною концентрацією донорної домішки. Висота потенціального бар'єра на межі може змінюватися через порушення рівноваги й інжекції гарячих носіїв та їх перерозподілу між каналом і підкладкою. Отже, потенціальний бар'єр у підкладці пов'язаний як із просторовим зарядом електронів, що збагачують підкладку, так і з носіями, інжекттованими з каналу в підкладку.

У міру перекриття каналу збільшується частка носіїв, що перейшли через потенціальний бар'єр у підкладку і дрейфують по підкладці. Проникнення носіїв у підкладку пов'язане з гальмуванням у поперечному полі потенціального бар'єра. Ймовірність міждолинного розсіяння для цієї частки носіїв зменшується через втрати енергії під час інжекції через потенціальний бар'єр у підкладку. Це приводить до зменшення

температури електронного газу і збільшення середньої дрейфової швидкості потоку носіїв. Крім того, збільшення дрейфової швидкості пов'язане з ослабленням домішкового розсіювання через низьку концентрацію донорної домішки подібно до того, як це відбувається в гетероструктурних транзисторах типу *HEMT*. Як показано в роботі [69], пікові значення дрейфової швидкості приблизно в 1,5...2 рази можуть перевищувати значення швидкості в каналі, де переважають ефекти розігрівання і накопичення носіїв. Незважаючи на те, що зворотний перехід електронів з підкладки в канал за затвором пов'язаний зі зростанням енергії, коли набута потенціальна енергія перетворюється на кінетичну, виконання умов для переходу електронів у верхню долину дещо затримуватиметься через скінченний час релаксації. У цілому це спричиняє послаблення міждолинного розсіювання і розігрівання електронного газу.

Вираз, що описує зміну середньої енергії електронів каналу і підкладки, виведено в роботах [70; 71] у вигляді

$$dE = \frac{I_K dE_K + I_\Pi dE_\Pi}{I_K + I_\Pi} = \frac{(E_\Pi - E_K + eV_K)d(I_{\Pi,K} - I_{K,\Pi})}{I_K + I_\Pi},$$

де $dI_{K,\Pi}$, $dI_{\Pi,K}$ – прирости струмів на ділянці dx за рахунок інжекції носіїв з каналу в підкладку і їх повернення в канал. Під час інжекції електронів з каналу в підкладку ($dI_{\Pi,K} > dI_{K,\Pi}$) відбувається зменшення енергії носіїв, що приводить до охолодження електронного потоку.

Розглянуті фізичні процеси враховуються у фізико-топологічній моделі [29; 69], що включає такі рівняння для каналу:

$$\begin{aligned} d(\mathcal{E}h) &= \left(\frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \right) h[n(x) - N_d]dx; \\ d(envhW) &= dI_{K,\Pi} - dI_{\Pi,K}; \\ dE &= e\mathcal{E}dx - \left[\frac{E - E_0}{v\tau_E} \right] dx + \left[\frac{E - E_\Pi + eV_K}{I_K} \right] dI_{\Pi,K}; \\ d(m^*v) &= \left(\frac{e\mathcal{E}}{v} \right) dx - \left(\frac{m^*}{\tau_p} \right) dx + \left[\frac{m_\Pi^*v_\Pi - m^*v}{I_K} \right] dI_{\Pi,K}; \end{aligned}$$

$$h(x) = a - \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0[V_B - V_{gs} + V(x)]}{eN_d}};$$

$$dV = \mathcal{E}dx,$$

й аналогічні рівняння для підкладки:

$$d(\mathcal{E}_\Pi h_\Pi) = \left(\frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0}\right) h_\Pi [n_\Pi(x) - n_{cp}] dx;$$

$$d(en_\Pi v_\Pi h_\Pi W) = -dI_{\kappa,\Pi} + dI_{\Pi,\kappa};$$

$$dE_\Pi = e\mathcal{E}_\Pi dx - \left[\frac{E_\Pi - E_0}{v\tau_{E\Pi}}\right] dx + \left[\frac{E - E_\Pi - eV_\kappa}{I_\kappa}\right] dI_{\kappa,\Pi}; \quad (4.27)$$

$$d(m_\Pi^* v_\Pi) = \left(\frac{e\mathcal{E}_\Pi}{v_\Pi}\right) dx - \left(\frac{m_\Pi^*}{\tau_{p\Pi}}\right) dx - \left[\frac{m_\Pi^* v_\Pi - m^* v}{I_\kappa}\right] dI_{\kappa,\Pi};$$

$$h_\Pi(x) = a + \sqrt{2}l_{e,\Pi} - \sqrt{a^2 + \frac{2\varepsilon\varepsilon_0[V_B - V_{gs} + V(x) - V_p]}{eN_d}};$$

$$dV_\Pi = \mathcal{E}_\Pi dx,$$

а також рівняння, що описують струмообмін між каналом і підкладкою і пов'язують дві попередні системи в єдину систему рівнянь:

$$dI_{\kappa,\Pi} = 0,901eD_\Pi W[n_\Pi - 0,637\sqrt{N_d N_{d,\Pi}}] \frac{dx}{l_{e,\Pi}}; \quad (4.28a)$$

$$dI_{\Pi,\kappa} = 0,366eD_\kappa W[n(x) - N_d] \frac{dx}{l_{e,\Pi}}, \quad (4.28b)$$

де \mathcal{E} , \mathcal{E}_Π – напруженість поздовжнього електричного поля в каналі та у підкладці; h , h_Π – відповідно товщина каналу й ефективна товщина підкладки; N_d , $N_{d,\Pi}$ – рівні легування епітаксіального шару і підкладки; n , n_Π – поточні значення концентрації електронів у каналі й підкладці, v , v_Π – середні значення дрейфової швидкості носіїв у каналі та в підкладці; $dI_{\kappa,\Pi}$, $dI_{\Pi,\kappa}$ – складові повного струму відповідно з каналу в підкладку й з підкладки в канал; E , E_Π – середні значення енергії носіїв каналу й підкладки; E_0 – рівноважне значення енергії; τ_E , τ_p – час релаксації енергії та імпульсу носіїв у каналі і, з відповідним

індексом, у підкладці; m^* , $m_{\text{п}}^*$ – середні за долинами значення ефективної маси носіїв у каналі та в підкладці; V_b , V_{gs} – потенціал бар'єра Шоттки й різниця потенціалів затвор-витік; $V(x)$, $V_{\text{п}}(x)$ – поточне значення потенціалу каналу й підкладки (потенціал підкладки набуває змісту тільки у разі повністю перекритого каналу); $n_{\text{ср}}$ – середнє (рівноважне) значення концентрації в підкладці; V_p – потенціал «відсікання» струму стоку; l_e , $l_{\text{еп}}$ – довжини екранування у каналі та в підкладці; D_k , $D_{\text{п}}$ – коефіцієнти дифузії для каналу і підкладки; V_k – контактний потенціал (висота потенціального бар'єра «канал-підкладка»); a – товщина епітаксiального шару; W – ширина транзистора; T – температура кристала. Решту позначень показано на рис. 4.8.

Вид рівнянь неперервності, Пуассона, балансу імпульсу та енергії, що входять до системи рівнянь (4.26)–(4.28), наведено в додатках (Д4.1–Д4.4). Ці рівняння містять похідні від товщини каналу і підкладки, що виправдовує використання наближення плавного каналу.

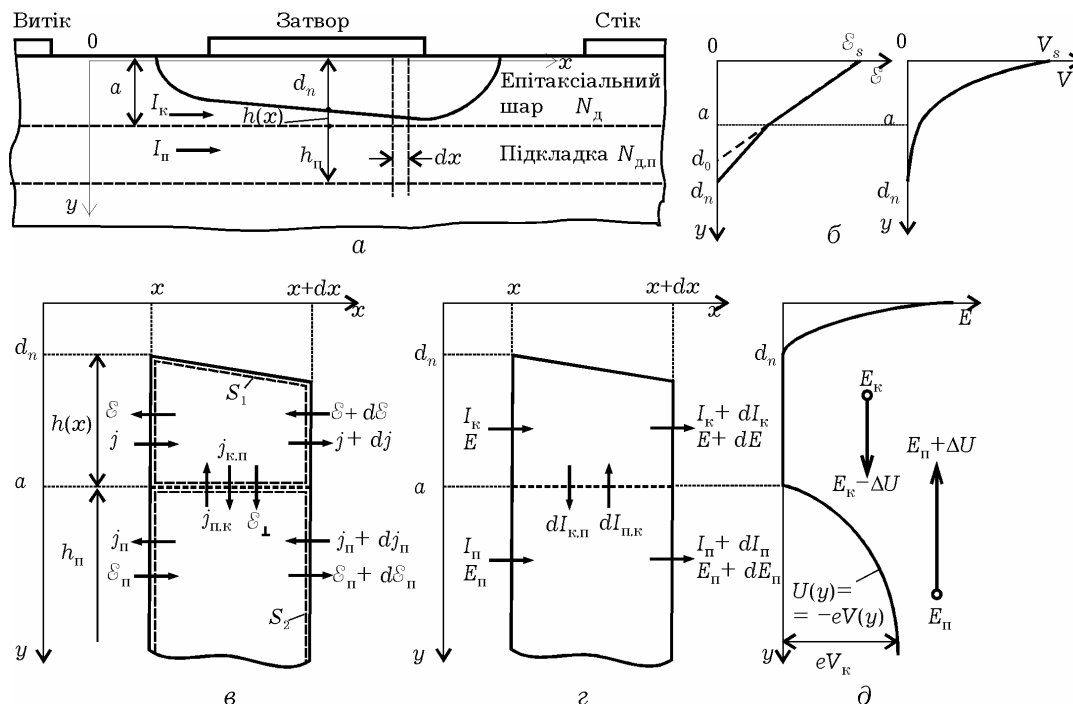


Рис. 4.8. Схеми, що пояснюють виведення основних рівнянь для каналу і підкладки

Для чисельного розв'язку системи рівнянь (4.26)–(4.28) активна область транзистора розбивається на ділянки завдов-

жки Δx і диференціали замінюються скінченними приростами. Системи для каналу і підкладки з урахуванням рівнянь зв'язку (4.28) розв'язуються узгоджено на кожному кроці інтегрування. Область інтегрування починається на відстані від витокового кінця затвора, рівного товщині епітаксialного шару, де ефектів розігрівання електронів фактично немає. Область, що залишилася до витоку, вважають омичною – у ній повний струм стоку розподіляється на струм каналу і струм підкладки відповідно до їх провідності з урахуванням збагаченого шару в підкладці. Ці значення струмів визначають (за законом Ома) напруженість електричного поля і відповідно до рухливості – дрейфову швидкість та енергію електронів. Початкове значення концентрації беруть N_d , а для підкладки – $n_{\text{ср}} = (N_d N_{d\text{п}})^{1/2}$. Через відсутність ефектів сплеску стаціонарні значення швидкості й напруженості поля, необхідні для знаходження часу релаксації, обирають рівними поточним значенням. Початкове значення потенціалу в каналі дорівнює спаду напруги на омичному опорі витоку.

У разі перекриття каналу інтегрується тільки система рівнянь для підкладки. На виході з підкладки і в разі розширення каналу біля стокового кінця затвора для забезпечення неперервності шуканих функцій використовують граничні умови, за яких змінні каналу присвоюють значення змінних підкладки. Надалі процеси релаксації описуються повною системою рівнянь моделі.

Процедура інтегрування триває доти, поки змінні величини не досягнуть рівноважних значень. Коефіцієнти дифузії в каналі й підкладці, що входять до рівнянь зв'язку (4.28), у загальному випадку залежать від напруженості електричного поля і можуть описуватися деякою апроксимуючою функцією залежно від напруженості поля, або за співвідношенням Ейнштейна, пропорційно рухливостям та електронним температурам у каналі й підкладці (див. розд. 3.5). Важливою особливістю квазідвовимірної моделі є можливість моделювання поточних значень основних параметрів перенесення електронів як у каналі, так і в підкладці, що дає змогу знаходити схемні параметри польових транзисторів

на основі аналізу фізичних процесів. Так, наприклад, під час інтегрування системи рівнянь моделі розраховується температура електронного газу в каналі й підкладці, а також усереднена температура. Ці величини використовують для розрахунку міри розігрівання електронів у шумовій моделі для опису розігрівного шуму. Крім того, у процесі інтегрування розраховують прирости потенціалів і зарядів під затвором для малосигнального аналізу схемних параметрів, а також час прольоту електронів в активній області транзистора, потрібний для розрахунку високочастотної крутизни транзистора.

Результати моделювання розподілів характерних величин уздовж каналу зображено на рис. 4.9 для транзисторів з довжиною затвора 0,25 мкм (нижній ряд) і 0,5 мкм (верхній ряд) для двох значень напруги зміщення 0 В (крива 1) та мінус 1 В (крива 2). Товщина епітаксiального шару модельованих транзисторів становить 0,12 мкм, концентрація домішки – $2 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$, ширина транзисторів – 300 мкм. Точками позначено результати моделювання за допомогою кінетичної моделі, суцільними лініями – квазідвовимірної.

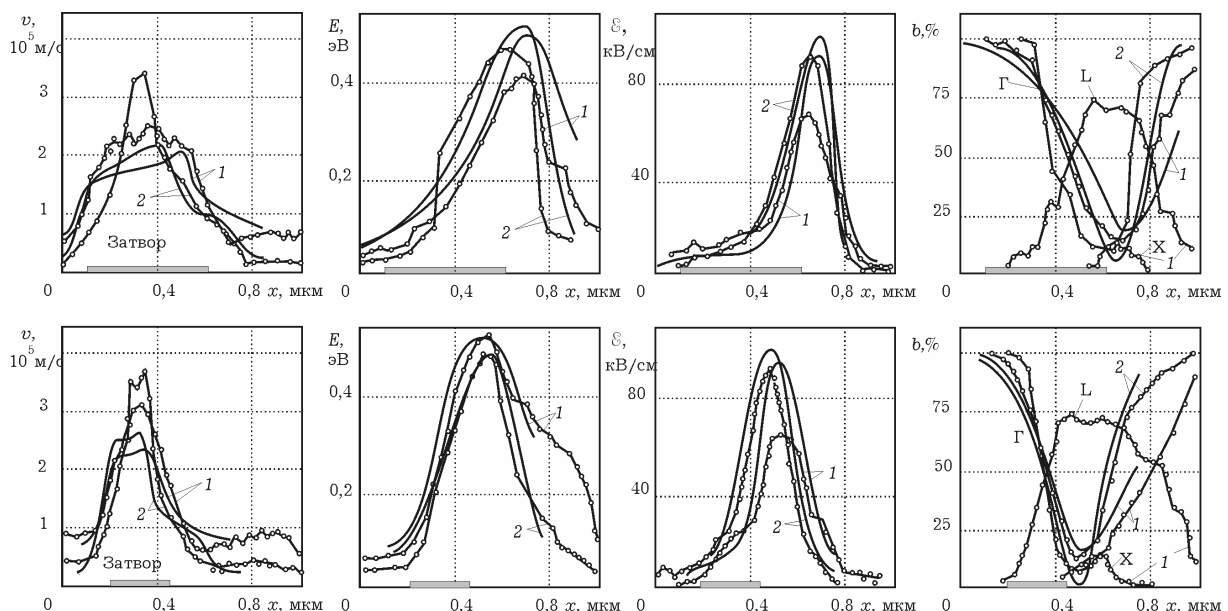


Рис. 4.9. Розподіли дрейфової швидкості, енергії, напруженості електричного поля, заселеності долин для потенціалів на затворі 0 В (криві 1) та –1,0 В (криві 2).

Суцільними лініями і лініями з кружками позначені відповідно результати розрахунків за квазідвовимірною і кінетичною моделями

В основу кінетичної моделі покладено метод частинок, в якому розраховується рух модельних частинок у самоузгодженому електричному полі з урахуванням механізмів розсіювання і граничних умов [6; 63]. Під час моделювання використовувалася тридолинна Γ -L-X модель зонної структури GaAs з урахуванням непараболічності. Час вільного пробігу кожної частинки, вид розсіювання і новий стан хвильового вектора після розсіювання визначався методом Монте-Карло. Параметри матеріалу, необхідні для обліку механізмів розсіювання, брали такі, як, наприклад, у роботі [64], при цьому враховувалися процеси розсіювання на акустичних, полярних оптичних, міждолинних фононах і на іонізованих домішках.

Двовимірне рівняння Пуассона розв'язувалось методом циклічної редукції з використанням методу матриці ємності для врахування електродів. Граничні умови для рівняння Пуассона – $\varphi = \text{const}$ на електродах і $d\varphi/dn = 0$ на решті межі напівпровідника. Для моделювання транзистора використовувалася сітка розмірністю 180×65 з вічком 10×5 нм, крок часу перерахунку поля становив 25 фс, кількість модельованих частинок – до 10 000. Оскільки для кожної частинки на кожному часовому кроці відомі її координати x , y і компоненти хвильового вектора k_x , k_y , k_z , то, проводячи статистичну обробку, можна отримати середні залежності $n_{\text{cp}}(x)$, $v_{\text{cp}}(x)$, $\mathcal{E}(x)$ і т. д. Середня дрейфова швидкість визначалася, наприклад, так. Весь прилад уздовж координати x розбивався на M інтервалів. На кожному часовому кроці підраховувалася кількість частинок, що потрапили в i -й інтервал, N_i і визначалася їх середня дрейфова швидкість у цьому інтервалі $v_{\text{ср}xi}$ за формулою

$$v_{\text{ср}xi} = \left(\frac{\hbar}{N_i} \right) \sum_{j=1}^{N_i} \frac{k_{xj}}{m_j^* (1 + 2\alpha_j E_j)},$$

де k_{xj} – x -та складова хвильового вектора; m_j^* – ефективна маса; α_j – коефіцієнт непараболічності; E_j – енергія j -ї частинки.

Для зменшення статистичних флуктуацій проводилося додаткове усереднювання за часовим інтервалом 2...4 пс. Середній струм підкладки $I_{\text{п}}(x)$ визначався за формулою $I_{\text{п}}(x) = qv_{\text{пх}}(x)N_{\text{пх}}(x)/\Delta x$, де q – заряд частинки; $v_{\text{пх}}(x)$ – середня дрейфова швидкість у підкладці; $N_{\text{пх}}(x)$ – середня кількість частинок у підкладці в інтервалі Δx , де проводиться усереднювання.

Результати моделювання наочно ілюструють ефект сплеску дрейфової швидкості вище за значення $1,8 \cdot 10^5$ м/с, яке характерне для стаціонарного дрейфу в однорідному полі в GaAs. Цей сплеск більш сильний для транзистора із затвором 0,25 мкм, оскільки в ньому електричне поле досягає характерних значень (близько 20 кВ/см) на менших відстанях, поки розігрівання електронів ще незначне. Пік дрейфової швидкості спостерігається в обох транзисторах, коли приблизно 30 % електронів переходить у верхні долини.

Кінетична модель дає також негативний сплеск, що спостерігається на спаді електричного поля. Пікове значення швидкості помітне менше в квазідвовимірній моделі, що пояснюється повільнішим наростанням електричного поля на початковій ділянці підзатворної області й менш інтенсивним переходом електронів у верхні долини. Ця розбіжність може бути зменшена корекцією під час розрахунку часу релаксації для різних механізмів розсіяння в квазідвовимірній моделі.

Зазначимо також, що сильніший сплеск спостерігається зі збільшенням від'ємної напруги на затворі, оскільки при цьому електричне поле в каналі більш сильне. Крім того, збільшення швидкості пов'язане і з витісненням струму в підкладку, де рухливість електронів вища через істотне ослаблення домішкового розсіювання, а також із впливом потенціального бар'єра на межі «епітаксіальний шар–підкладка».

З порівняння помітна характерна для субмікронних транзисторів розбіжність положень максимумів дрейфової швидкості й середньої енергії електронів. Енергія продовжує зростати навіть зі зменшенням швидкості, що пов'язано з інтенсивним

переходом електронів у верхні долини і зростанням їх ефективних мас. Процеси релаксації спостерігаються у разі спадання електричного поля, максимум якого міститься лівіше за стічний кінець затвора і збігається з екстремумами функцій $E(x)$, $b(x)$. Характерно, що обидві моделі, попри різні значення електричного поля, дають близькі значення максимальної енергії, що не перевищує 0,5 еВ.

Виразно видно, що процес охолодження при відкритому каналі відбувається значно довше, ніж при закритому, проте це не означає, що час релаксації в цих режимах істотно різний. Загальна кількість електронів, що створюють струм каналу в разі зміщення -1 В, приблизно втричі менша, ніж у відкритому каналі, тому природно, що усереднювання енергії та кількості гарячих електронів у разі їх потрапляння в омичну область за затвором, де електрони переважно холодні, приводитиме до швидкого їх охолодження – тим більшого, чим менший струм каналу.

Найбільш помітна відмінність між використовуваними моделями спостерігається при моделюванні струму, що витісняється з каналу в підкладку (рис. 4.10). Видно, що максимальні значення струму підкладки приблизно збігаються, а у разі зміщення -1 В канал повністю перекривається і весь струм витісняється в підкладку. Проте помітна відмінність у функціях розподілу струму підкладки уздовж затвора, що свідчить про необхідність більш точного моделювання процесів струморозподілу в квазідвовимірній моделі. Цього можна досягти, враховуючи контактну різницю потенціалів «канал–підкладка», що змінюється уздовж каналу, набуваючи різних коефіцієнтів дифузії для матеріалів підкладки й епітаксialного шару.

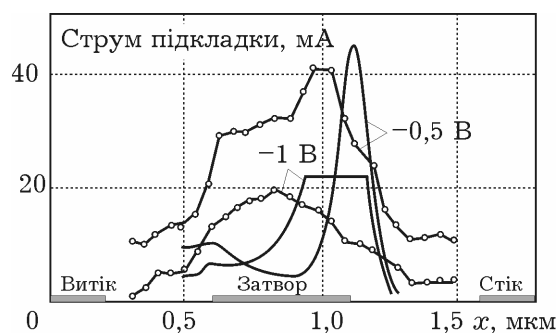


Рис. 4.10. Розподіли струму підкладки в кінетичній (точки) і квазідвовимірній (суцільна лінія) моделі за різних зміщень на затворі

Попри вказану відмінність результати моделювання ВАХ (рис. 4.11) для 0,5 і 0,25 мкм можна визнати задовільними. Квазідвовимірна модель для транзистора з довжиною затвора 0,25 мкм дає занижені значення струму стоку і відповідно крутизни сток-затворної характеристики. Це пов'язано не лише з розбіжністю значень дрейфової швидкості, але і, мабуть, з тим, що для цих розмірів активної частини каналу (0,25×0,12 мкм) наближення квазідвовимірної моделі про форму збідненої області стають вже достатньо грубими. Проте ця модель правильно враховує збільшення нахилу ВАХ у разі вкорочування затвору, а також адекватно описує режим запирання транзистора.

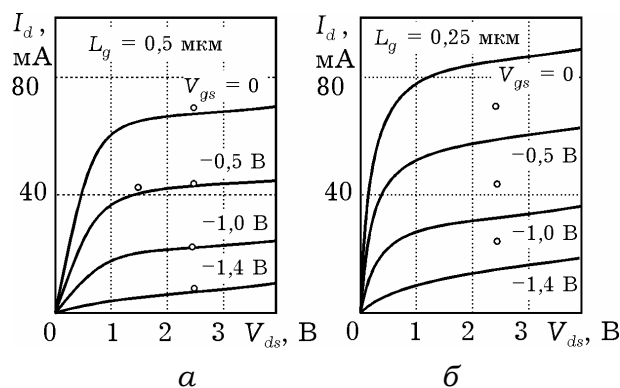


Рис. 4.11. Вольт-амперні характеристики ПТІШ з довжиною затвора 0,5 мкм (а) і 0,25 мкм (б)

Незважаючи на деяку відмінність результатів кінетичного і квазідвовимірного моделювання (рис. 4.10), розподіли струму підкладки в цілому підтверджують правильність фізичних припущень квазідвовимірної моделі щодо ролі підкладки [29; 69; 72–74].

Це ж підтверджує і хороший збіг розрахункових та експериментальних статичних ВАХ, сток-затворної і стокової характеристик, показаних на рис. 4.12, для транзистора з такими фізико-топологічними параметрами: довжина затвора становить 0,5 мкм, ширина – 300 мкм, товщина епітаксiального шару – 0,12 мкм, концентрація домішки в епітаксiальному шарі – $1,9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, у підкладці – $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, міжелектродні відстані «витік–затвор» і «затвор–стік» – по 0,6 мкм, висота металізації смужки затвора – 0,6 мкм.

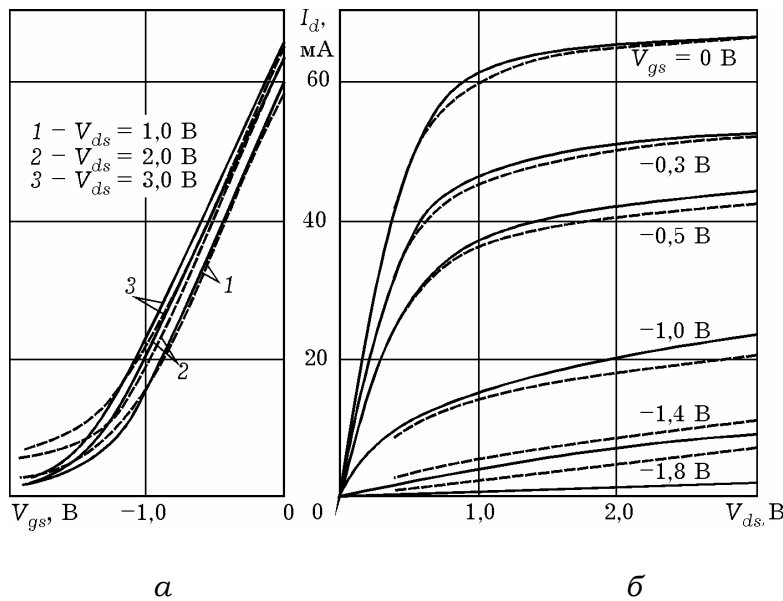


Рис. 4.12. Сток-затворні (а) і стокові (б) характеристики ПТШ:
суцільні лінії – експериментальні, штрихові – розрахункові

До особливостей статичних ВАХ можна віднести відсутність ділянок насичення струму стоку, а також близьку до омичної залежність струму стоку за потенціалу затвору нижче $-1,4$ В, який з урахуванням бар'єрної різниці потенціалів відповідає потенціалу перекриття каналу.

Помітна відмінність характеристик спостерігається в області напруг затвора, близьких до потенціалу перекриття ($\cong 1,4$ В). (Особливості моделювання цього режиму будуть докладно розглянуті в підрозд. 4.4.)

4.3. СХЕМНІ МОДЕЛІ ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА ШОТТКІ

Схемна модель дозволяє, за відомих її параметрів, розрахувати вихідні сигнальні й шумові характеристики. Під час складання схемних моделей активних твердотільних компонентів треба мати на увазі, що схемна модель із зосередженими параметрами не є однозначною, оскільки твердотільні компоненти за своєю природою є розподіленими структурами.

Найчастіше використовуються схемні моделі із зосередженими параметрами, які визначаються з фізико-топологічної

моделі, що містить рівняння Пуассона, рівняння неперервності струму, рівняння руху, рівняння збереження імпульсу та енергії.

У режимі малого сигналу за фізико-топологічною моделлю розраховують прирости струмів, напруги і зарядів для розрахунку параметрів схемної моделі.

4.3.1. Малосигнальна модель

Найпростіша ідеальна схемна модель транзистора, в якому струмом стоку I_d керує напруга затвора V_{gs} і стоку V_{ds} , на низьких частотах може бути подана колом, що містить ідеальне залежне джерело струму SV_{gs} , кероване входною напругою, і паралельно з'єднаною вихідною провідністю G_d , де S – крутизна сток-затворної характеристики ПТШ.

Типовий вигляд схемної моделі транзистора подано на рис. 4.13. Окрім джерела струму, керованого напругою, і вихідної провідності вона включає компоненти, що моделюють деякі характерні області транзистора. Це насамперед компоненти активної частини, які моделюються у межах квазідвовимірної моделі: ємність «затвор–витік» C_{gs} , ємність «стік–затвор» C_{gd} , опір каналу R_i , ємність C_f та опір R_f домена у стоковій частині каналу, опори омичних областей епітаксialного шару біля витіку і стоку, які доповнюють перехідні опори омичних контактів до повних опорів R_s і R_d .

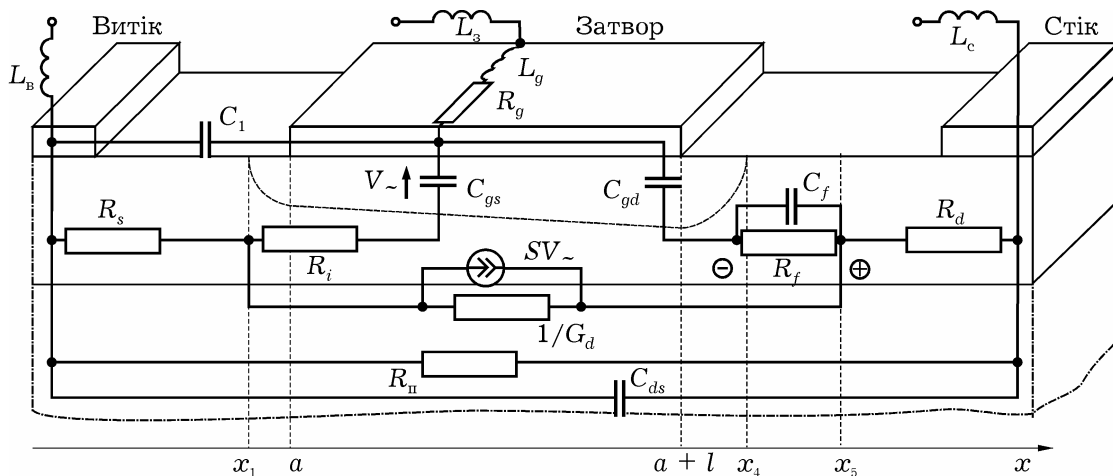


Рис. 4.13. Схемне подання областей субмікронного ПТШ на надвисоких частотах

Малосигнальні параметри схемної моделі визначають за малими приростами напруги затвора і струму стоку, що задаються. Методи їх знаходження описано в дод. Д4.

В області КВЧ у схемній моделі субмікронного ПТШ необхідно враховувати також паразитні параметри корпусу і виводів. Зазвичай синтез і параметрична ідентифікація паразитних кіл пов'язані з вимірюваннями і використанням процедур оптимізації, проте в першому наближенні їх можна розраховувати, як вказано в дод. Д4.5.

Із наведених параметрів найбільшу вагу як з погляду відображення специфіки субмікронних транзисторів, так і з погляду оптимізації характеристик, мають крутизна S , вихідна провідність G_d , вхідна C_{gs} і прохідна C_{gd} ємності.

Найбільший інтерес для подальшого схемотехнічного проектування становить аналіз залежностей вихідної провідності й крутизни від електричного режиму (рис. 4.14).

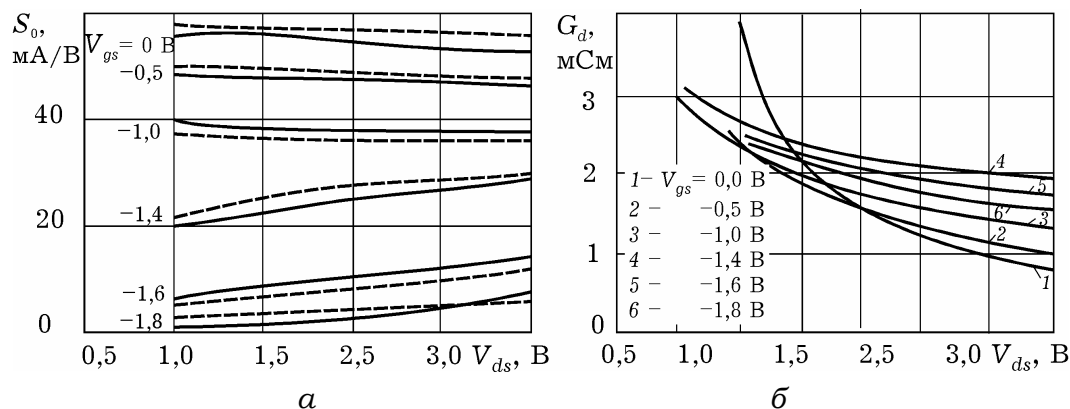


Рис. 4.14. Залежності крутизни (а) і вихідної провідності (б) від напруги стоку

Зменшення вихідної провідності зі збільшенням потенціалу стоку пов'язане передусім з розширенням збідненої області й зменшенням товщини каналу і, відповідно, розігріванням електронів у сильному полі, їх переходом у верхні долини і збільшенням ефективної маси. Ці ефекти слабшають у міру витіснення електронів у підкладку і деякого їх охолодження за рахунок подолання потенціального бар'єра на межі епітаксialного шару з підкладкою. Якщо потенціали затвора близькі до потенціалу

відсікання, дрейф у підкладці переважає, що сприяє зростанню швидкості, а отже, зумовлює збільшення вихідної провідності. Цьому потенціалу відповідають максимальний нахил стокової характеристики і максимальна вихідна провідність.

Залежності вхідної і прохідної ємностей (рис. 4.15) від електричного режиму на електродах досить монотонні, якщо потенціали стоку вищі за 1 В. Різниця між розрахунковими й експериментальними значеннями вхідної ємності на деяку постійну величину, рівну приблизно 0,2 пФ, можна пояснити наявністю деякої паразитної ємності між витком і затвором, не пов'язаної зі зміною заряду збідненої області й тому незалежною від потенціалу на затворі. До особливостей залежності прохідної ємності можна віднести певне її зростання при запиранні транзистора, помітне на експериментальних характеристиках.

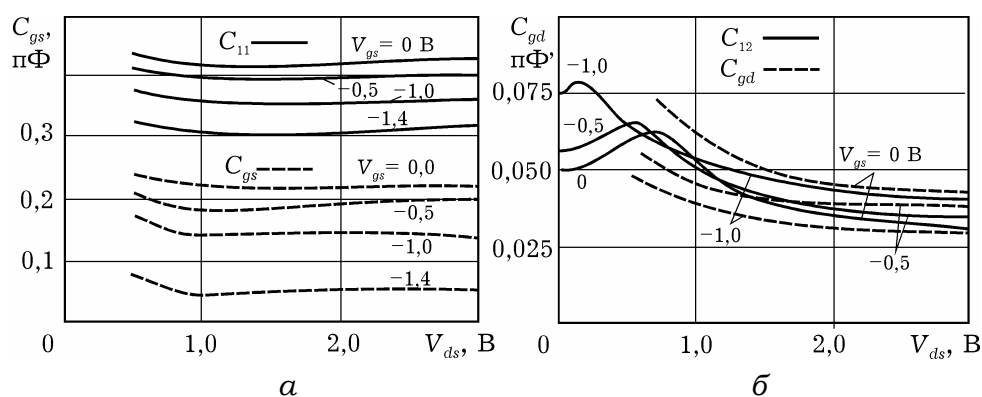


Рис. 4.15. Порівняння експериментальних (суцільні лінії) залежностей для вхідної ємності C_{11} й розрахованих (штрихові лінії) для ємності C_{gs} (а), а також прохідної ємності та ємності C_{gd} (б) від напруги стоку

Цікаво проаналізувати вплив геометричних розмірів структури транзистора, зокрема довжини затвора, на параметри схемної моделі транзистора в робочому електричному режимі. З укороченням довжини затвора виявляється ряд ефектів, властивих субмікронним структурам, які впливають на схемні параметри, особливо на передавальні характеристики. Крім того, у зв'язку з широким діапазоном зміни потенціалів на електродах вимагає адекватного моделювання субпороговий режим, коли значення струму стоку на декілька порядків менше, ніж струм насичення відкритого транзистора.

Параметри схемної моделі: крутизни S_0 , вихідної провідності G_d , вхідної ємності «затвор-витік» C_{gs} і прохідної ємності «затвор-стік» C_{gd} залежно від потенціалу затвора V_{gs} зображено на рис. 4.16. Зменшення довжини затвора приводить до поліпшення параметрів транзистора – збільшення крутизни, зменшення вхідної і прохідної ємностей майже до напруги відсікання. Спостережуване у разі вкорочення затвора зростання крутизни і вихідної провідності транзистора пов'язане із впливом вже описаних короткоканальних ефектів. Слід відзначити наявність екстремумів на залежності вихідної провідності від потенціалу на затворі у разі вкорочення затвора, пов'язаних переважно із струмозподілом між каналом і підкладкою та ефектом «сплеску» дрейфової швидкості. Якщо потенціали близькі до потенціалу відсікання, вхідна ємність практично не залежить від довжини затвора і від електричного режиму і визначається крайовою ємністю витокового кінця затвора.

Зростання прохідної ємності у разі збільшення довжини затвора може бути пов'язане з посиленням ефекту накопичення носіїв біля стокового кінця затвора й утворенням статичного домена.

Наведені залежності отримані для структури з характерними фізико-топологічними параметрами: товщиною епітаксiального шару 0,12 мкм, концентрацією донорів у цьому шарі $1,9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, міжелектродними відстанями 0,8 мкм.

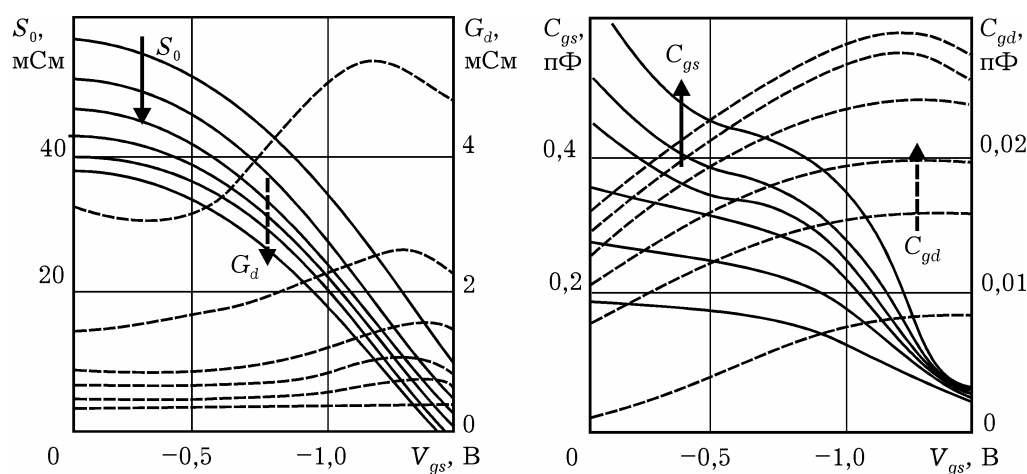


Рис. 4.16. Залежності малосигнальних крутизни, вихідної провідності, вхідної та прохідної ємностей від напруги на затворі. Напрямок стрілок відповідає збільшенню довжини затвора від 0,25 до 1,5 мкм із кроком 0,25 мкм

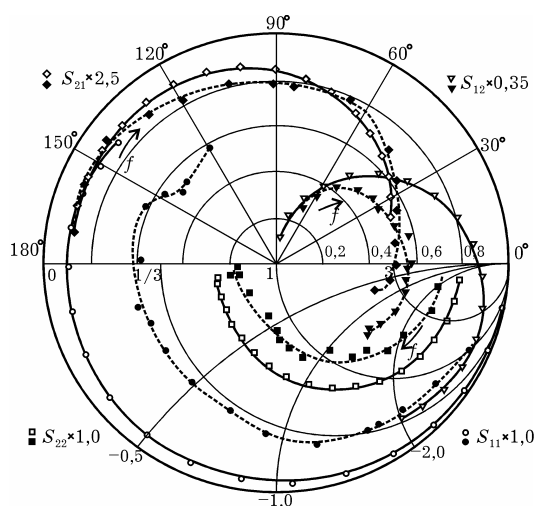


Рис. 4.17. Подання частотних характеристик елементів матриці розсіювання в полярних координатах (угорі) і на сітці повної провідності (внизу); частотні мітки наведено, починаючи з частоти 1 ГГц, у напрямку стрілок із кроком 1 ГГц; штрихові лінії – експериментальні.

Перехід від фізико-топологічної моделі до малосигнальної схемної моделі дозволяє, використовуючи добре відпрацьований апарат теорії кіл із зосередженими параметрами [76], провести розрахунок Y -матриці транзистора, яка потім за відомим співвідношенням $[S] = ([I] - [Y])([I] + [Y])^{-1}$ перераховується в матрицю розсіювання.

Типові частотні залежності S -параметрів транзистора подано на рис. 4.17. (Слід звернути увагу на масштабні множники.) З використанням апарату

НВЧ-кіл вони дозволяють розраховувати вхідні пристрої, де зазвичай використовуються ПТШ. Втім, квазідвовимірна модель дозволяє, аналізуючи значення малосигнальних параметрів у порівняно широкому діапазоні живильної напруги, використовувати її для розрахунків нелінійних пристроїв.

4.3.2. Шумова модель

Відомо багато моделей ПТШ (аналітичних, квазідвовимірних, двовимірних, кінетичних), що відрізняються розмірністю розв'язуваних рівнянь, рівнем строгості та об'ємом обчислювальних витрат. Проте в роботах з описом цих моделей немає докладного аналізу складових шуму і не подано фізичної інтерпретації малошумного режиму роботи ПТШ.

Один зі способів схемотехнічного аналізу мінімального коефіцієнта шуму в субмікронних ПТШ ґрунтується на використанні квазідвовимірної фізико-топологічної моделі [75], що дозволяє розраховувати параметри схемної моделі (рис. 4.13) і шумової моделі з різного роду локальними джерелами шуму (рис. 4.18).

У стані термодинамічної рівноваги спектральна густина шуму описується співвідношенням Найквіста, при цьому справедливе співвідношення Ейнштейна $D = \mu k_B T / e$, яке, строго кажучи, виконується, коли електрони мають розподіл Максвелла.

У сильних електричних полях проявляються ефекти розігрівання і зростає *дифузійний шум*, тобто шум, зумовлений розсіянням носіїв [77].

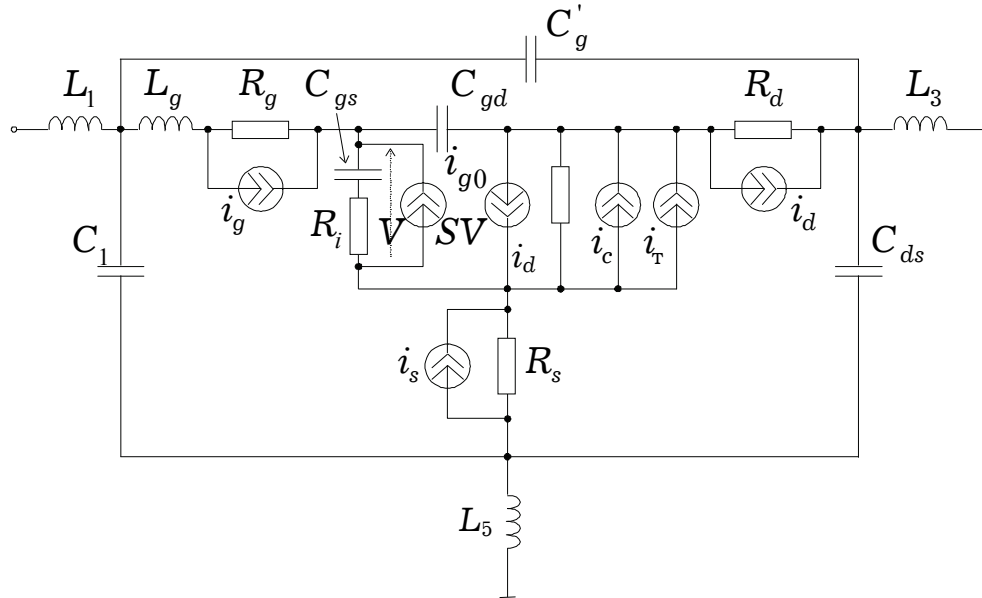


Рис. 4.18. Шумова схемна модель субмікронного ПТШ

Спектральна густина теплового шуму, пов'язана з флуктуаціями швидкості, описується співвідношенням

$$S_i(\omega) = \frac{4k_B T e n(x) \mu \Delta y \Delta z}{\Delta x} = \frac{4k_B T}{\Delta R},$$

де ΔR – опір об'єму $\Delta x \Delta y \Delta z$, $\Delta R = \Delta x / e \mu n(x) \Delta y \Delta z$.

Найбільш характерними для НВЧ діапазону і субмікронних польових структур є такі джерела шуму.

Шум каналу польового транзистора [78] визначається співвідношенням $\overline{|i_c|^2} = P 4k_B T_e \Delta f S_0$, де P – коефіцієнт, що враховує нетеплову природу шуму каналу (у сильних електричних полях збільшується внесок шуму каналу за рахунок зменшення рухливості електронів); T_e – температура електронного газу.

Шуми областей, що перебувають у термодинамічній рівновазі, – омичних контактах стоку і витоку, металізації затвора – описуються співвідношенням Найквіста:

$$\overline{|i_s|^2} = \frac{4k_B T_e \Delta f}{R_s}; \quad \overline{|i_g|^2} = \frac{4k_B T_e \Delta f}{R_g}; \quad \overline{|i_d|^2} = \frac{4k_B T_e \Delta f}{R_d}.$$

Шум, наведений на затворі, пов'язаний з тим, що на високих частотах флуктуації струму приводять за рахунок ємнісного зв'язку із затвором до флуктуацій наведеного струму затвора (частотно-залежний шум):

$$\overline{|i_{g0}|^2} = \frac{4k_B T_e \Delta f R \omega^2 C_{gs}^2}{S_0},$$

де R – коефіцієнт, близький до одиниці й залежний від потенціалу на електродах транзистора. Це джерело корельоване з джерелом, що описує шум каналу $\overline{|i_c|^2}$, ступінь кореляції знаходять за формулою

$$C = \frac{\overline{j i_{g0} i_c^*}}{\sqrt{\overline{i_{g0}^2} \overline{i_c^2}}},$$

$$\text{звідки } \overline{i_c i_{g0}^*} = -jC \sqrt{\overline{|i_c|^2} \overline{|i_{g0}|^2}} = -j4k_B T_e \Delta f \cdot \omega C_{gs} \cdot C \sqrt{PR}.$$

У короткоканальних (субмікронних) транзисторах слід враховувати шум струмозподілу між каналом і підкладкою, пов'язаний з випадковим характером розподілу струму між двома колами. За аналогією з вакуумним тетродом можна записати:

$$\overline{|i_T|^2} = 2e \left(\frac{I_K I_\Pi}{I_C} \right) \Delta f,$$

де I_d , I_K , I_Π – струм стоку, складові струму каналу й підкладки. Як видно з останнього співвідношення, максимальний шум струмозподілу спостерігається за $I_K \approx I_\Pi$.

З аналізу складових шуму субмікронного ПТШ можна зробити такі висновки.

Малощумний режим пов'язаний з напругою на затворі, близькою до напруги потенціалу відсікання струму стоку. У цьому режимі носії під затвором рухаються по підкладці, здолавши потенціальний бар'єр «канал-підкладка» і втративши частину енергії. Це приводить до зменшення ймовірності між-долинного розсіяння і зменшення шуму, пов'язаного з розігріванням носіїв, яке, як буде показано, переважає в субмікронних ПТШ. Шум струмозподілу за напруги на затворі, близької до напруги відсікання $|V_{gs}| \approx |V_p|$, мінімальний, оскільки повний струм через транзистор близький або дорівнює за величиною струму підкладки. Вклад цієї складової шуму в цьому режимі мінімальний.

Шум, наведений на затворі, в малощумному режимі також мінімальний, оскільки вхідна ємність C_{gs} зі збільшенням напруги на затворі $|V_{gs}|$ зменшується.

Шум каналу близький до мінімального, оскільки залежність малосигнальної крутизни $S_0 = f(V_{gs})$ обернено пропорційна і залежність температури шуму від напруги на затворі має мінімум.

На основі наведеної методики й аналізу складових шуму для типової транзисторної структури з розміром затвора $0,5 \times 300$ мкм в оптимальному електричному режимі отримані частотні залежності шуму показано на рис. 4.19.

Мінімальний коефіцієнт шуму забезпечується як вибором електричного режиму, так і умовами узгодження [77]. Методика розрахунку мінімального коефіцієнта шуму може бути зведена до таких етапів.

На першому етапі, використовуючи принцип супер-

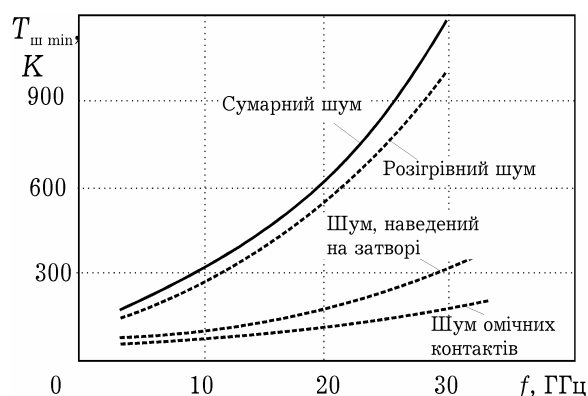


Рис. 4.19. Складові шумової температури субмікронного ПТШ

позиції для лінійних кіл, локальні шумові джерела шуму перераховуються до входу і до виходу ПТШ у вигляді чотириполіусника, при цьому сумарні струми на вході й на виході:

$$I_{\text{ш.вх}} = i'_g + i'_{g0} + i'_t + i'_s + i'_d;$$

$$I_{\text{ш.вих}} = i''_g + i''_{g0} + i''_t + i''_s + i''_d.$$

На другому етапі розраховують хвильові шумові τ -параметри:

$$\tau_{11} = \frac{I_{\text{ш.вх}} I_{\text{ш.вх}}^*}{4k_B T \Delta f R_0 Y_\Gamma^2}; \quad \tau_{22} = \frac{I_{\text{ш.вих}} I_{\text{ш.вих}}^*}{4k_B T \Delta f R_0 Y_H^2};$$

$$\tau_{12} = \frac{I_{\text{ш.вх}} I_{\text{ш.вих}}^*}{4k_B T \Delta f R_0 Y_\Gamma Y_H}, \quad \tau_{12} = \tau_{21}^*,$$

де R_Γ – стандартний опір (хвильовий опір ліній) нормування; Y_Γ та Y_H – провідність генератора і навантаження відповідно.

У припущенні великого посилення ($S_{12} \ll S_{21}$), коли шумами навантаження можна знехтувати, мінімальний коефіцієнт шуму запишемо [78] як

$$F_{\min} = 1 + \frac{\tau_{22} - b + \sqrt{(\tau_{22} + b)^2 - 4|c|^2}}{2|S_{21}|^2},$$

де $b = \tau_{11}|S_{21}|^2 - 2\text{Re}(\tau_{12}S_{21}S_{11}^*)$; $c = \tau_{22}S_{11} - \tau_{12}S_{21}$.

Оптимальний коефіцієнт відбивання по входу з урахуванням узгодження входу чотириполіусника визначимо як

$$\Gamma_{1\text{opt}} = \frac{2c^*}{\tau_{22} + b + \sqrt{(\tau_{22} + b)^2 - 4|c|^2}}.$$

Якщо припустити, що впливу навантаження на шуми на вході немає, що майже завжди виконується, і за умови узгодження на виході чотириполіусника на максимальну передачу потужності (комплексно-спряжене узгодження) для коефіцієнта відбивання на виході можна записати:

$$\Gamma_2 = \left[S_{22} + \frac{\Gamma_1 S_{12} S_{21}}{1 - \Gamma_1 S_{11}} \right]^*.$$

Далі за відомих частотних характеристик шуму і матриці розсіяння ПТШ розраховують частотні залежності «супутнього» коефіцієнта підсилення за потужністю, оптимальні навантаження на вході й на виході, коефіцієнт стійкості та інші характеристики.

На основі розглянутих джерел шуму зі схемної шумової моделі можна розрахувати потужність шуму $\Delta P_{\text{швих}}$, що створюється ними на виході транзистора, і знайти еквівалентну шумову температуру $T_{\text{ш}} = \Delta P_{\text{ш}} / K_p k_B \Delta f$. Деякі результати моделювання шумових властивостей транзистора показано на рис. 4.20.

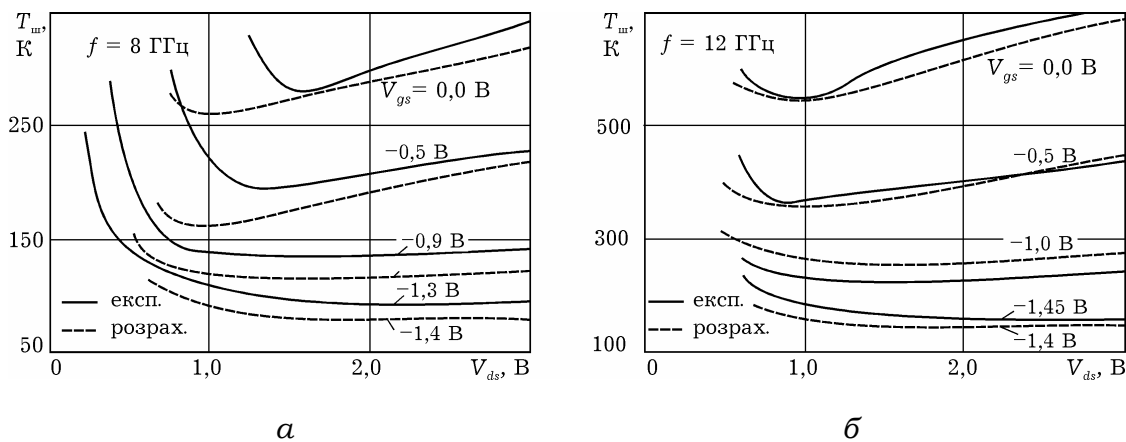


Рис. 4.20. Експериментальні (суцільні лінії) і розрахункові (штрихові лінії) залежності шумової температури від напруги стоку на частоті 8 ГГц (а) і 12 ГГц (б)

Результати на рис. 4.20 показують особливість шумових властивостей субмікронних польових транзисторів – переважний вплив розігрівних ефектів, які можуть ослаблятися за наявності напівізолювальної підкладки. Це стає очевидним в разі сумісного аналізу розподілів дрейфової швидкості, складової струму через підкладку (див. рис. 4.10), а також шумової температури (рис. 4.20). Максимальне значення дрейфової швидкості у майже закритому транзисторі ($V_{gs} = -1,0$ В) приблизно в 1,5 разу перевищує значення швидкості у відкритому ($V_{gs} = -1,0$ В). У відкритому каналі максимальний струм підкладки біля стокового краю затвора становить близько 70 % від повного струму, тоді як за $V_{gs} = -1,0$ В – близько 90 %. Це приводить до помітного прояву ефекту «сплеску» швидкості та ослаблення розігрівних ефектів. Порівняння розподілів

швидкості та струму підкладки з отриманим у результаті моделювання методом частинок (див. рис. 4.9), а також збіг мінімуму шуму і максимуму вихідної провідності за $V_{gs} = -1,4$ В (рис. 4.21), коли весь струм витіснено в підкладку, підтверджує висновок про «охолоджувальний» вплив підкладки, що обмежує розігрівання електронів.

Зазначимо, що наявність максимуму на залежності вихідної провідності від напруги на затворі (рис. 4.21) є характерною для малoshумних транзисторів. На великій вибірці малoshумних транзисторів експериментально встановлено, що максимум вихідної провідності досягається поблизу напруги на затворі, яка відповідає малoshумному режиму транзистора. При цьому, чим помітніший максимум провідності, тим більш яскраво виражений мінімум на залежності мінімальної шумової температури (мінімального коефіцієнта шуму) від напруги на затворі.

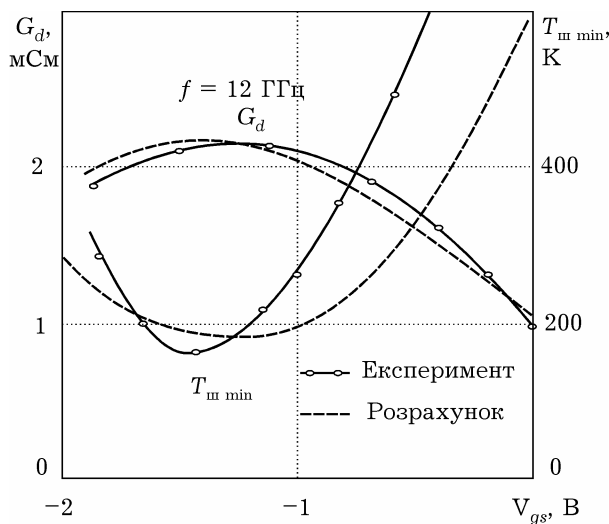


Рис. 4.21. Експериментальна і розрахункова залежності шумової температури і вихідної провідності субмікронного ПТШ від напруги на затворі

Під час проектування субмікронних транзисторів для надшвидкодійних схем [79–81] ставиться умова хорошого «відсікання» струму стоку, коли на сток-затворній характеристиці немає характерного експоненціального «хвоста» за напруги, близької до відсікання. Це досягається за рахунок зменшення провідності підкладки та вимагає створення більш високих і різких потенціальних бар'єрів

на межі «епітаксiальний шар–підкладка». З одного боку, при цьому істотно зменшується екстремум на залежності вихідної провідності від напруги на затворі, що зменшує ступінь нелінійності динамічних характеристик транзистора. З другого боку, відсутність «охолоджувального» потенціального бар'єра

у підкладці ослаблює ефект «сплеску» дрейфової швидкості та зменшує середню дрейфову швидкість носіїв у каналі, що спричиняє погіршення швидкісних характеристик транзистора. Отже, розробка субмікронних транзисторів для надшвидкодіючих інтегральних схем вимагає оптимального вибору конструкції, топології та електрофізичних параметрів (рівнів легування каналу, концентрації домішок у підкладці, геометричних розмірів та ін.). Для оптимізації характеристик надшвидкодіючих пристроїв також можуть використовуватися квазі-двовимірні моделі [29; 69], що поєднують високу фізичну інформативність з економічністю в розрахунках.

4.4. МОДЕЛІ ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА ШОТТКІ ДЛЯ РЕЖИМУ ВЕЛИКОГО СИГНАЛУ

Розглянемо модифіковані моделі, в яких, на відміну від роботи [68], враховані особливості струмоперенесення поблизу режиму відсікання струму (субпороговий режим) [64], за від'ємного потенціалу стоку (інверсний режим), а також за додатних потенціалів затвора [68], коли істотну роль відіграють струми прямозмщеного бар'єра Шотткі. Одним із результатів моделювання є стокові ВАХ (рис. 4.22), розраховані в широкому діапазоні живильних напруг.

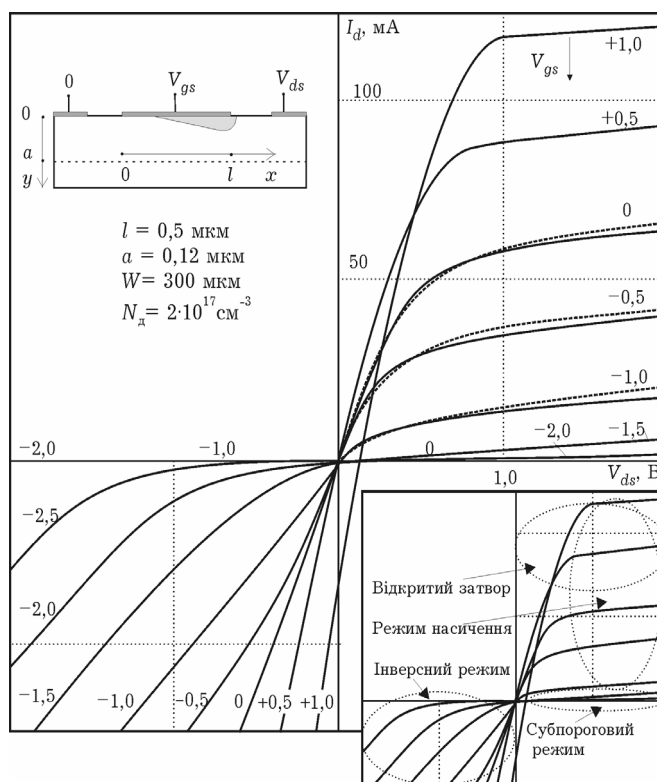


Рис. 4.22. Сімейство вихідних характеристик, отримане з нелінійної моделі ПТШ (штрихові лінії – експериментальні характеристики; на вставці позначено характерні нелінійні режими)

4.4.1. Субпороговий режим

Розглянемо особливість роботи субмікронного арсенід-галієвого польового транзистора в субпороговому режимі (поблизу режиму відсікання струму стоку) і покажемо можливість керування струмом стоку не лише за допомогою зміни товщини провідного каналу, але й за рахунок надбар'єрного проходження електронів у витоковій частині каналу в разі його перекриття.

Арсенід-галієві ПТШ використовуються для створення різних НВЧ пристроїв і надшвидкодіючих цифрових інтегральних схем [69]. У транзисторах з довжиною затвора, меншою за 1 мкм, час перемикання може становити декілька пікосекунд (без урахування паразитних реактивних елементів). Розрахунок часу перемикання вимагає правильного моделювання субпорогового режиму. У субмікронних транзисторах істотну роль відіграє провідність підкладки, яка стає особливо помітною поблизу режиму відсікання, що виявляється, зокрема, в існуванні струму стоку за напруги на затворі, вищої від порогової (рис. 4.23, а).

Експериментальна сток-затворна характеристика для субпорогового режиму добре лінеаризується (рис. 4.23, б) у напівлогарифмічних координатах [67], що вказує на її експоненціальний характер.

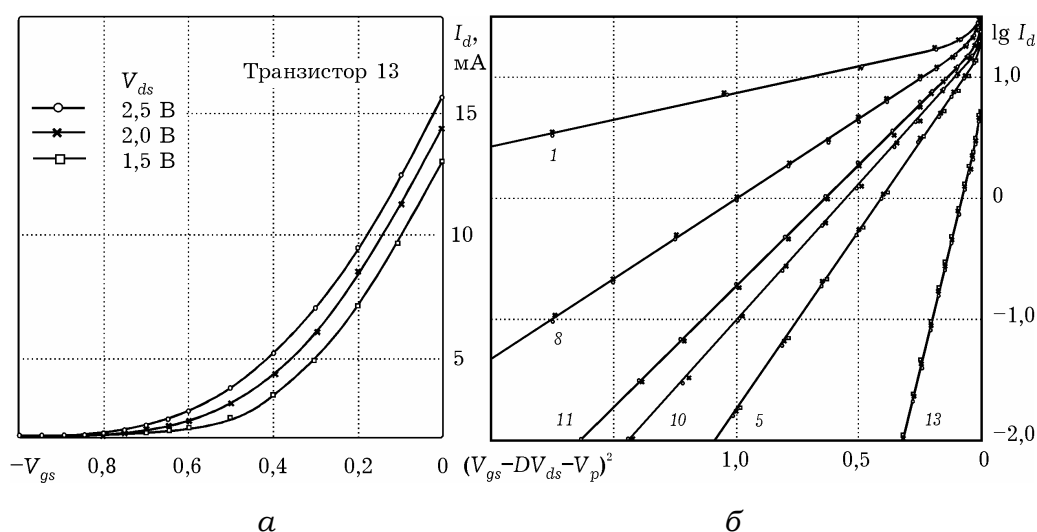


Рис. 4.23. Експериментальні сток-затворні характеристики ПТШ за різної стокової напруги у природних і спрямних координатах (біля кривих вказано умовні номери зразків транзисторів)

Експоненціальний характер спадання струму стоку в разі запирання транзистора може бути пояснений за допомогою кінетичної моделі Монте-Карло. За порогової напруги канал перекривається у витоковій частині, де утворюється потенціальний бар'єр, добре помітний на рис. 4.24. Існування струму стоку при цьому пояснюється надбар'єрним проходженням електронів за рахунок початкових теплових швидкостей від витоку в область прискорювального поля каналу.

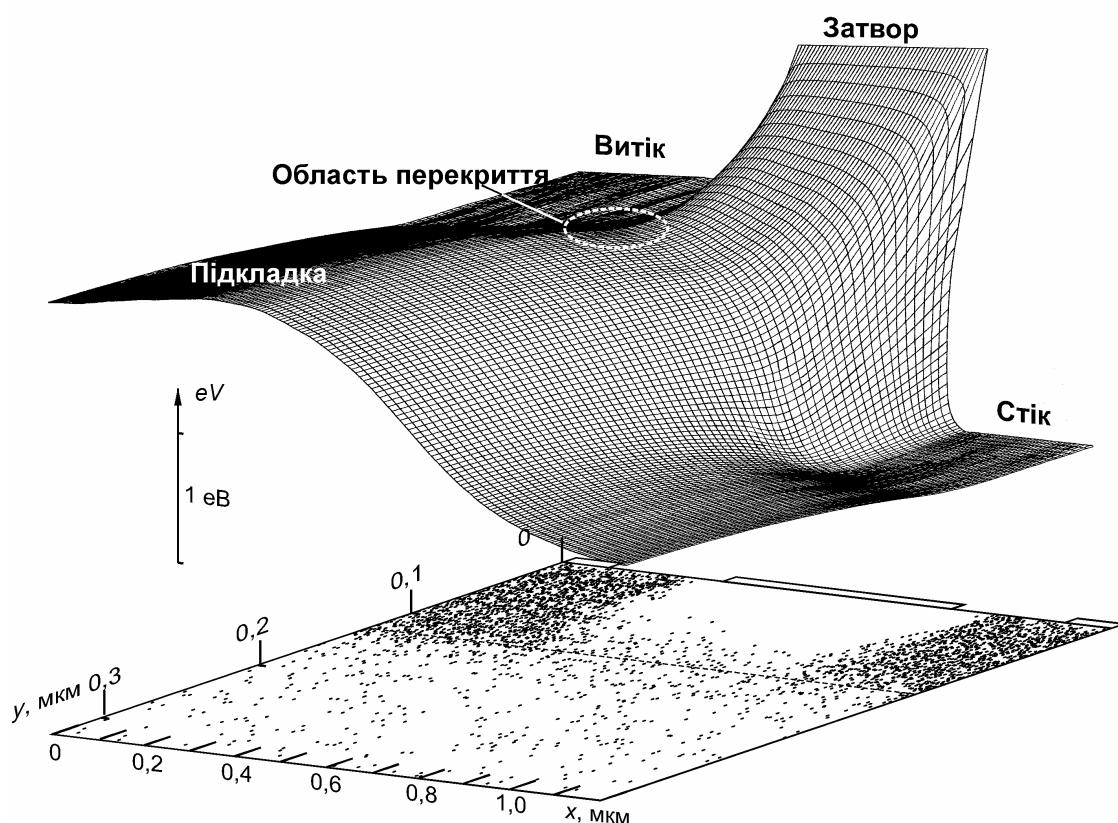


Рис. 4.24. Потенціальний рельєф і розподіл електронів у каналі ПТШ поблизу режиму перекриття

У квазідвовимірній моделі цей механізм можна врахувати, задаючи в початкових умовах концентрацію електронів, значення якої знаходять з максвеллівського розподілу за відомої висоти потенціального бар'єра. Проте розрахунок висоти бар'єра неможливий у межах традиційного припущення про чітку межу збідненої області й вимагає обліку більш реальної форми поперечного перерізу каналу, яка утворюється суперпозицією параболічного розподілу потенціалу збідненої області

під затвором і логарифмічного розподілу в збагаченому шарі підкладки [67].

Якнайповніше це можна змодельовати за допомогою кінетичних моделей (Монте-Карло) але їх використання нераціональне через значну тривалість обчислень, потрібну в цьому режимі для проведення статистичного усереднювання. Для моделювання субпорогового режиму транзистора під час нелінійного схемотехнічного аналізу наближення чіткої межі збідненої області не дозволяє правильно описати фізичні процеси протікання струму, тому необхідний більш точний опис форми провідного каналу.

У режимі перекриття потенціальний рельєф у поперечному перерізі (рис. 4.25) створюється суперпозицією поля збідненої області під затвором і поля просторового заряду електронів, інжекттованих у підкладку. Труднощі адекватного моделювання пов'язані з тим, що розподіл потенціалу біля затвора відомий лише у припущенні чіткої межі збідненої області. Насправді цей розподіл закінчується експоненціальними «хвостами» з просторовою константою, рівною довжині екранування l_e . Поблизу режиму перекриття розподіл потенціалу в поперечному перерізі каналу можна подати (вставка на рис. 4.25) як суму:

$$V_{\text{підкл}}(y) = V_0 \exp\left[-\frac{y + h / 2}{l_e}\right];$$

$$V_{\text{збідн}}(y) = V_0 \exp\left[\frac{y - h / 2}{l_e}\right],$$

де h – ширина каналу, що зазвичай не дорівнює розглядуваній, а відрізняється від неї на деяку постійну величину. Також невизначеним є потенціал V_0 .

Сумарний розподіл потенціальної енергії електрона $U(y) = -eV(y)$ може бути поданий функцією

$$U(y) = 2U_0 e^{-h/2l_e} \operatorname{ch}\left(\frac{y}{l_e}\right) = U_{\min} \operatorname{ch}\left(\frac{y}{l_e}\right) \approx U_{\min} \left(1 + \left(\frac{y}{l_e}\right)^2\right). \quad (4.29)$$

Розподіл електронів у поперечному перерізі каналу можна подати за допомогою моделі викривлених зон $[E_c(y) = E_{c0} - eV(y)]$:

$$\begin{aligned} n(y) &= N_c \exp\left[\frac{E_F - E_c}{k_B T}\right] = N_d \exp\left[\frac{eV(y)}{k_B T}\right] = \\ &= N_d \exp\left(\frac{-U_{\min}}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{U_{\min} y^2}{k_B T l_e^2}\right). \end{aligned} \quad (4.30)$$

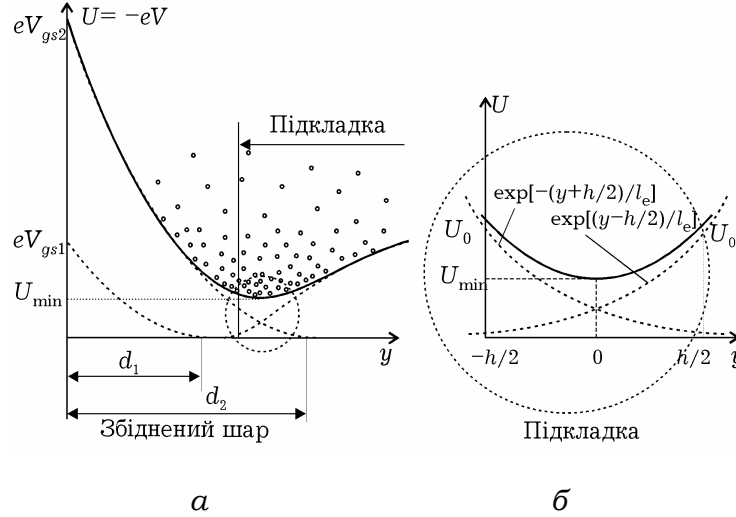


Рис. 4.25. Форма потенціального рельєфу в поперечному перерізі каналу біля витоку (а), що ілюструє надбар'єрне проходження електронів, і його параболічна апроксимація (б)

Використання максвеллівського розподілу тут виправдане тим, що в точці максимального перекриття каналу біля витоку поздовжнє прискорювальне поле дорівнює нулю й електрони долають потенціальний бар'єр висотою U_{\min} за рахунок теплової швидкості. Для моделювання процесів у транзисторі з використанням квазідвовимірної моделі [29; 70] з виразу (4.30) знайдемо середню концентрацію електронів, що забезпечує протікання струму стоку в субпороговому режимі:

$$n_{cp} = \left(\frac{1}{h}\right) \int_{-\infty}^{\infty} n(y) dy = \left(\frac{2N_d}{h}\right) \int_0^{\infty} \exp\left[\frac{eV(y)}{k_B T}\right] dy. \quad (4.31)$$

Після інтегрування (4.31) з використанням виразу (4.29) і табличного інтеграла отримаємо функцію

$$n_{cp} = N_d \sqrt{\pi} \left(\frac{l_e}{h}\right) \exp\left(\frac{-U_{\min}/k_B T}{\sqrt{U_{\min}/k_B T}}\right). \quad (4.32)$$

З урахуванням позначення $U_{\min} = 2U_0 e^{-h/2l_e}$ з функції (4.32) отримаємо

$$n_{cp} = N_d \frac{\sqrt{\pi} l_e}{h} \frac{\exp[-(2U_0 / k_B T) \exp(-h / 2l_e)]}{\sqrt{(2U_0 / k_B T) \exp(-h / 2l_e)}}. \quad (4.33)$$

Електрони з такою концентрацією створюють надбар'єрний струм за рахунок теплової швидкості $v_t = \sqrt{3k_B T / m^*}$ з густиною $j = en_{cp}v_t / 4$. За ширини транзистора $W = 300$ мкм і товщини каналу порядку довжини екранування l_e вони забезпечують за потенціалу перекриття струм порядку міліамперів, що добре узгоджується з експериментом (див. рис. 4.23).

Отриманий вираз може бути використаний у моделях, оснований на чисельному інтегруванні системи одновимірних рівнянь, проте воно містить параметри (U_0 і h), що важко ідентифікуються і незручні для простих моделей.

В аналітичних моделях можна застосовувати співвідношення

$$I_d = I_{d0} \exp[\alpha(V_{gs} - V_p - DV_{ds})^2], \quad (4.34)$$

яке виходить безпосередньо з експериментальних результатів. На рис. 4.23 видно, що сток-затворні характеристики лінеаризуються в координатах $\ln I_d$ і $(V_{gs} - V_p - DV_{ds})^2$, збігаючись для різних стокових напруг, і їх «хвости» можуть бути описані виразом (4.34).

Параметри I_{d0} , α , D легко визначити з результатів експерименту: коефіцієнт α – за нахилом лінеаризованих характеристик, величина D , рівна відношенню $\Delta V_{ds} / \Delta V_{gs}$ за $I_d = \text{const}$, показує відносний ступінь впливу стокової напруги на струм стоку, а значення I_{d0} знаходять як екстрапольоване значення струму в точку $V_{gs} - V_p - DV_{ds} = 0$. Слід звернути увагу, що для дослідженої партії транзисторів значення I_{d0} майже однакові й становлять $I_{d0} \cong 25$ мА. Цю величину можна інтерпретувати як максимальний струм надбар'єрної «емісії» (з «віртуального катода»), що забезпечується омічним контактом без прискорювального поля. Значення D мають порядок

0,01 і за фізичним змістом аналогічні проникності сітки у вакуумному тріоді. Найбільший розкид спостерігається для коефіцієнта α , який має значення $1 \dots 10 \text{ В}^{-2}$. Він найбільш критичний до технологічних похибок у виробництві, тому за відповідної його ідентифікації може служити хорошим критерієм для тестування транзисторів.

Отримані результати свідчать про те, що в субпороговому режимі, на відміну від звичайного для польових транзисторів керування струмом за рахунок товщини каналу («резистивний» механізм), можливий також *інший механізм керування*. Він пов'язаний з проникненням поля стоку в область витоку і подібний до впливу поля анода на просторовий заряд біля катода у вакуумному тріоді. Це підтверджується зміною виду сток-затворних характеристик: від «пентодного» вигляду за мікронних довжин затвора до «тріодного» за довжин близько 0,1 мкм (див. рис. 4.3).

4.4.2. Відкритий затвор

Проектування НВЧ пристроїв, що працюють у широкому динамічному діапазоні, вимагає розробки нелінійних моделей активних компонентів [82–85].

Розглянемо модель транзистора, яка враховує один із характерних нелінійних ефектів, що виникають за умови відкривання бар'єра затвора з позитивним зміщенням.

У межах квазідвовимірної моделі ефект відкривання бар'єра затвора можна врахувати, зменшуючи на кожному кроці інтегрування струм каналу на величину, відповідну ВАХ бар'єра Шотткі за відомої різниці потенціалу затвора і поточного потенціалу каналу. Особливість такої процедури полягає в тому, що потенціал затвора залежить від спаду напруги на опорі металізації за рахунок протікання повного струму затвора, значення якого знаходять тільки в кінці процедури інтегрування.

Картину фізичних процесів для вироблення прийнятних спрощень подано на рис. 4.26, де зображено стокову характеристику транзистора. У режимі насичення порівняно великий потенціал стоку забезпечує існування збідненої області майже уздовж всього каналу навіть за додатного потенціалу затвора. Зі зменшенням потенціалу стоку знижується й потенціал уздовж каналу. Бар'єр Шотткі відкривається насамперед з боку витoku, і частина електронів виходить з каналу, створюючи струм затвора. Подальше зменшення потенціалу стоку приводить до розширення відкритої частини затвора і відкриття бар'єра з боку стоку. Більше того, якщо потенціал стоку менший від потенціалу затвора, струм стоку стає від'ємним.

Режим роботи транзистора без розігрівних явищ можна промодельовувати, нехтуючи за малої стокової напруги збідненою областю. Для каналу завтовшки a і завширшки W з концентрацією електронів n , що мають рухливість μ , очевидно, що на ділянці завдовжки dx струм каналу I викликає спад напруги:

$$dV = \frac{I(x)dx}{en\mu Wa}. \quad (4.35)$$

Струм каналу змінний, оскільки на кожній ділянці dx він зменшується на величину dI за рахунок виходу електронів з каналу в коло затвора. Вважаючи ВАХ відкритого бар'єра Шотткі лінійною для додатних зміщень, можна записати:

$$dI = g[V_{gb} - V(x)]Wdx, \quad (4.36)$$

де V_{gb} – потенціал затвора з урахуванням контактної різниці потенціалів на бар'єрі (типове значення $V_b \approx 0,8$ В), $V_{gb} = V_{gs} - V_b$; $V(x)$ – поточний потенціал каналу; g – провідність переходу «затвор–канал» одиничної площі. Цей параметр моделі слід ідентифікувати з додаткових вимірювань. У найпростішому випадку, нехтуючи перехідним опором контакту, можна вважати, що g визначається поперечним опором каналу половинної товщини: $g = 2en\mu/a$.

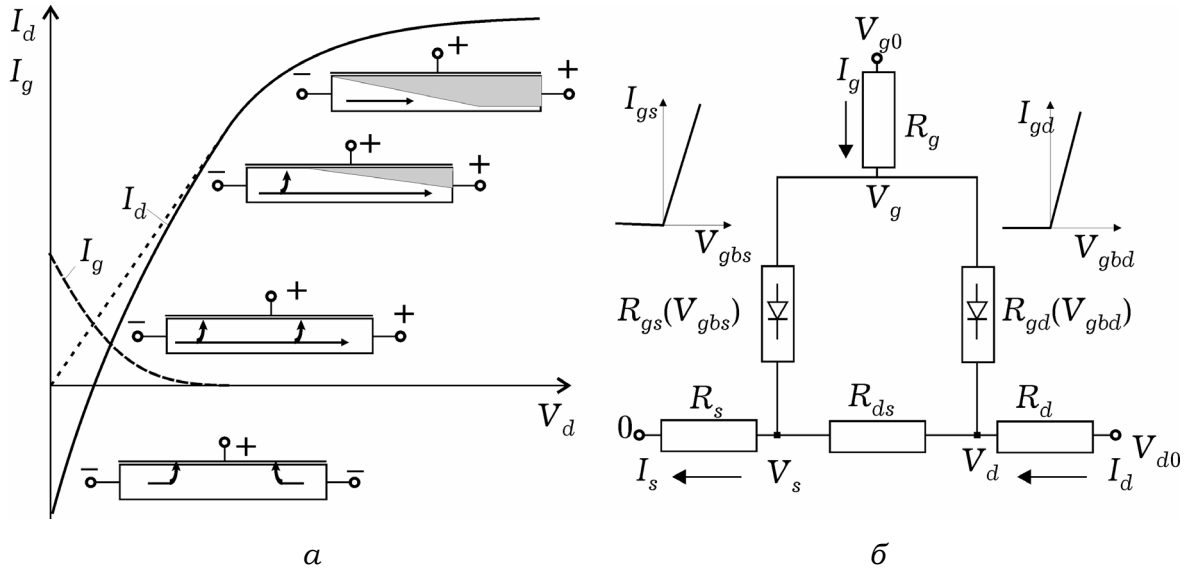


Рис. 4.26. До розрахунку початкової ділянки сток-затворної характеристики ПТШ за додатних потенціалів затвора: фізична модель, що показує трансформацію збідненої області та напрямки струмів стоку і затвора в різних режимах (а); схемна модель підзатворної області за додатних потенціалів затвора (б)

Систему рівнянь (4.35) і (4.36) легко розділити повторним диференціюванням і перехресною підстановкою:

$$\frac{d^2 I}{dx^2} = \alpha^2 I; \quad (4.37)$$

$$\frac{d^2 V}{dx^2} = -\alpha^2 [V_{gb} - V(x)], \quad (4.38)$$

де позначено $\alpha^2 \equiv g/en\mu a$.

Розв'язок рівнянь (4.37) та (4.38), що задовольняє крайові умови $V(0) = V_s$ и $V(L) = V_d$, можна подати у такому вигляді:

$$V_{gb} - V(x) = \frac{[V_{gbs} \text{sh} \alpha(L-x) + V_{gbd} \text{sh} \alpha x]}{\text{sh} \alpha L}; \quad (4.39)$$

$$I(x) = \frac{G[V_{gbs} \text{ch} \alpha(L-x) + V_{gbd} \text{ch} \alpha x]}{\text{sh} \alpha L}, \quad (4.40)$$

де $G = W\sqrt{gen\mu a}$.

Треба мати на увазі, що отримані розв'язки (4.39) та (4.40) справедливі для $V_{gb} - V(x) > 0$, інакше $I(x) = I(x_0) = \text{const} = I_d$ і

$$V(x) = V(x_0) + \frac{I(x_0)(x - x_0)}{en\mu W a}, \quad (4.41)$$

де x_0 – точка, в якій $V(x_0) = V_{gb}$.

З отриманих розв'язків безпосередньо отримують вирази для струму кожного з електродів:

$$I_s = I(0) = \frac{G[V_{gbs}(ch\alpha L - 1) + V_{ds}]}{sh\alpha L}; \quad (4.42)$$

$$I_d = I(L) = \frac{G[V_{gs} - V_{gbd}(ch\alpha L - 1)]}{sh\alpha L}; \quad (4.43)$$

$$I_g = I_s - I_d = \frac{G(V_{gbs} + V_{gbd})(ch\alpha L - 1)}{sh\alpha L}. \quad (4.44)$$

Вирази (4.42)–(4.44) визначають вид ВАХ безпосередньо активної частини каналу транзистора і відповідно вигляд схемної моделі. Остання може бути подана як трикутник з опорів відкритого затвора $R_{gs} = R_{gd} = sh\alpha L / G(ch\alpha L - 1)$ й опору «стік–витік» $R_{ds} = sh\alpha L / G$ (рис. 4.26). Треба мати на увазі, що опори R_{gs} і R_{sd} залежать від електричного режиму й керуються напругою V_{gbs} і V_{gbd} відповідно до ВАХ, наведених на цьому ж рисунку. У загальному випадку ВАХ затвора може бути описана й іншою прийнятною функцією, що вимагає задання відповідного вигляду нелінійності для величини G .

На відміну від поширеного подання підзатворної області у вигляді двох діодів, її схемна модель має бути подана трьома нелінійними резисторами, два з яких еквівалентні діодам і керуються напругою «затвор–витік» і «затвор–стік», а третій враховує їх взаємодію. Для моделювання цього режиму слід додатково ідентифікувати три параметри (V_b , i_{so} , m) з використанням апроксимації ВАХ затвора у вигляді $i = i_s [\exp(eV / mk_B T) - 1]$, $i_s = i_{so} \exp(-eV_b / k_B T)$, або два параметри (G , V_b) для кусково-лінійної апроксимації $i = 0$ за $V \leq V_b$, $i = G(V - V_b)$ за $V > V_b$.

Результати розрахунку за повною схемною моделлю транзистора, що включає паразитні опори стоку, витoku і металізації затвора, подано на рис. 4.27. У цьому випадку аналітична модель (4.42)–(4.44) має бути доповнена співвідношеннями

$$V_{d0} = V_d + I_d R_d; V_{g0} = V_g + I_g R_g; V_s = I_s R_s,$$

що дозволяють перейти від «внутрішніх» потенціалів до потенціалів на виводах транзистора у схемі зі спільним витоком. На розрахованих відповідно до цієї моделі початкових ділянках стокової характеристики транзистора для різних значень потенціалу затвора виразно видно два «злами», які відповідають відкриттю затвора біля витокового і стокового краю.

Повна схемна модель придатна для невеликої стокової напруги, і питання про поведінку транзистора в режимі насичення за великих додатних зміщень на затворі залишається поза межами прийнятих припущень.

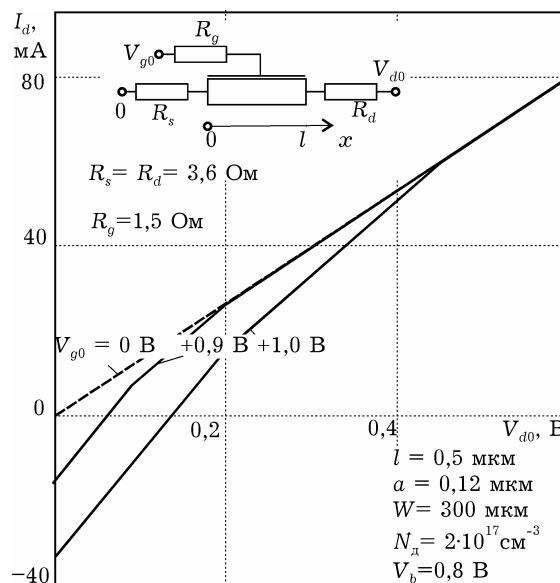


Рис. 4.27. Результати моделювання стокової характеристики ПТШ за додатних потенціалів затвора для кусково-лінійної апроксимації ВАХ бар'єра Шотткі

4.4.3. Інверсний режим

Моделювання інверсного режиму ПТШ пов'язане з необхідністю формування процедури інтегрування основних рівнянь моделі [68] назустріч електронному потоку. Незважаючи на принципову можливість створення такої процедури, зручніше, умовно помінявши стік і витік місцями, використовувати відпрацьовану модель для аналізу фізичних процесів. Але розраховуючи параметри схемної моделі треба мати на увазі, що спосіб їх визначення у використовуваній фізико-топологічній моделі відповідає схемі зі спільним стоком. Характерне для інверсного режиму те, що при потенціалах стоку, які мають більше від'ємне значення, ніж потенціал затвора (щодо витоку), на величину бар'єрного потенціалу, транзистор працює в режимі відкритого затвора.

Приклад моделювання статичних ВАХ для ПТШ з довжиною затвора 0,5 мкм порівняно з експериментальними даними показано на рис. 4.22. Нахил обвідних кривих на крутій ділянці

відповідає омичному опору стоку і витоку. Лише для потенціалу затвора 0,8 В помітне зменшення струму стоку через відкривання бар'єра затвора Шотткі. З підвищенням стокової напруги частина відкритого бар'єра зменшується і ВАХ на пологій ділянці має звичайний вигляд. За від'ємної стокової напруги відкривання бар'єра помітне для потенціалу 0,5 В; для решти значень – поза межами поданих графіків. З вигляду ВАХ для інверсного режиму випливає, що транзистор працює в неактивному режимі, оскільки ступінь впливу потенціалів затвора і стоку на струм стоку однаковий.

Фізико-топологічний рівень опису ПТШ дозволяє після етапу ідентифікації розрахувати схемні параметри для будь-якої робочої точки або в заданому діапазоні значень живильної напруги. Ці масиви параметрів згодом можуть бути використані безпосередньо в системах проектування із застосуванням, наприклад, сплайн-апроксимації.

Для моделювання високовольтного режиму необхідно врахувати особливість роботи ПТШ, яка полягає в тому, що дірки, які генеруються у процесі лавинного розмноження, витягуються з каналу полем затвора і не створюють «діркової» лавини. Це дає змогу користуватися простою теорією лавинних процесів і вважати, що струм каналу на кожному кроці інтегрування збільшується на $\Delta i_k = \alpha i_k \Delta x$ тільки за рахунок електронів, що генеруються. На таку ж величину зростає струм затвора, що на схемній моделі можна відобразити включенням між стоком і затвором нелінійного резистора. Тут потрібна додаткова ідентифікація параметрів залежності коефіцієнта іонізації α від напруженості електричного поля, яка може бути вибрана у вигляді $\alpha = \alpha_0 \exp(\mathcal{E}_0 / \mathcal{E})^n$.

Описані нелінійні моделі субмікронних ПТШ дозволяють урахувати ефекти за рівнів входних дій, порівнянних з напругою живлення транзистора. Моделі придатні для нелінійного моделювання пристроїв засобами САПР, поєднують можливості опису різних нелінійних ефектів у субмікронних ПТШ і не вимагають значних додаткових обчислювальних витрат.

4.5. ДВОВИМІРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СУБМІКРОННИХ ПОЛЬОВИХ ТРАНЗИСТОРІВ ШОТТКІ

Потреба у двовимірному моделюванні фізичних процесів, коли довжина затвора і розміри активної області не перевищують 0,5 мкм, зумовлена їх співмірністю з характерними розмірами високолегованих шарів і наявністю областей з високими градієнтами функцій, що описують електричні поля і фізичні характеристики електронного газу: концентрацію, швидкість, енергію. При цьому моделювання порівняно «великих» транзисторних структур (з розмірами близько 1 мкм і більше) може здійснюватися за спрощеною («локальною») двовимірною моделлю, що містить рівняння Пуассона і рівняння неперервності струму, а польова залежність рухливості електронів пов'язана з апроксимацією «стаціонарних» значень дрейфової швидкості. При цьому спільно вирішуються двовимірні рівняння Пуассона і рівняння неперервності, які в стаціонарному випадку є рівняннями в частинних похідних еліптичного типу. Рівняння Пуассона для модельованого ПТШ запишемо як

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = \frac{e}{\epsilon \epsilon_0} [n(x, y) - N_d(x, y)], \quad (4.45)$$

де $N_d(x, y)$ – функція, що задає профіль легувальної домішки в активній області транзистора.

Рівняння неперервності струму транзистора можна записати як

$$\operatorname{div}[D \operatorname{grad} n(x) - \mu \operatorname{grad} V(x)] = 0,$$

де D – коефіцієнт дифузії; μ – рухливість електронів.

У слабких полях коефіцієнт дифузії описується співвідношенням Ейнштейна: $D = \mu k_B T / e$. У сильних полях залежності рухливості електронів і дірок від напруженості електричного поля, температури і рівнів легування донорної та акцепторної домішок апроксимуються функціями, запропонованими в роботі [86].

Недолік використання апроксимацій полягає у необхідності проведення експериментальних досліджень польової залежності рухливості для різних матеріалів, а також «інтегральний» характер цих залежностей, що не дозволяє ідентифікувати внесок різних механізмів розсіяння в релаксаційні процеси. Фізичний спосіб визначення часу релаксації для різних механізмів розсіяння пов'язаний з підходом, наведеним у розд. 2, при цьому час релаксації розраховується за аналітичними співвідношеннями для окремих механізмів розсіяння і можна враховувати найбільш істотні з них.

Система рівнянь локальної моделі більш економічна для чисельного аналізу з погляду обчислювальних витрат, оскільки не включає релаксаційних рівнянь, і початкова система диференціальних рівнянь у частинних похідних має меншу розмірність, але вона непридатна для аналізу нестационарних ефектів.

З позицій адаптивного моделювання і побудови системи моделювання субмікронних приладів використання локальної двовимірної моделі виправдане для порівняно «великих» структур і може також використовуватися для отримання початкових наближень, отримання оцінок щодо кроку дискретизації рівнянь і кількості ітерацій обчислювального процесу, визначення розмірів активних і пасивних областей структури та ін. [87].

Більш цікава для аналізу нелокальна двовимірна модель. Розглянемо рівняння нестационарної двовимірної моделі субмікронного ПТШ (нелокальної моделі), яка основана на розв'язанні рівнянь Пуассона і неперервності, рівнянь збереження імпульсу та енергії; така модель у поєднанні з апроксимаціями часів релаксації енергії та імпульсу в сильних електричних полях дозволяє розрахувати як фізичні характеристики транзистора, так і статичні (вольт-амперні) характеристики в широкому діапазоні живильної напруги.

Початкова система рівнянь нелокальної двовимірної моделі має такий вигляд:

$$v_x \frac{\partial n}{\partial x} + v_y \frac{\partial n}{\partial y} = 0; \quad (4.46)$$

$$v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{e\mathcal{E}_x}{m^*} - \frac{v_x}{\tau_p}; \quad (4.47)$$

$$v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} = \frac{e\mathcal{E}_y}{m^*} - \frac{v_y}{\tau_p}; \quad (4.48)$$

$$v_x \frac{\partial T_e}{\partial x} + v_y \frac{\partial T_e}{\partial y} = -\frac{T_e - T_0}{\tau_E} + \frac{2E_d}{3k_B}(\gamma - 1); \quad (4.49)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} [n(x, y) - N_d(x, y)], \quad (4.50)$$

де дрейфова енергія визначається як $E_d = m^* v^2 / 2 = m^* (v_x^2 + v_y^2) / 2$.

Для розв'язання рівнянь область транзистора можна подати у вигляді скінченних елементів. Вибір методу розбиття зумовлений необхідністю апроксимації області зі складною конфігурацією, а також тим, що сильні поля локалізуються в області з розмірами 0,2...0,3 мкм біля стокового краю затвора, тож потрібна дрібніша сітка. Тріангуляція в методі скінченних елементів пов'язана з поданням модельованої області у вигляді сукупності трикутників. За відомими розподілами потенціалу у вузлах сітки розраховують напруженості електричного поля:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\text{grad } V(x, y). \quad (4.51)$$

Для розв'язання системи рівнянь (4.46)–(4.50) на електродах транзистора задають граничні умови Діріхле для потенціалу ($V = \text{const}$). На бічних межах задається однорідна умова Неймана ($\partial V / \partial \mathbf{n} = 0$), де \mathbf{n} – нормаль до цих меж. Аналогічні умови задаються на вільній поверхні між електродами транзистора.

Алгоритм розв'язання системи рівнянь (4.46)–(4.50) з урахуванням апроксимацій часів релаксації та рівняння для напруженості електричного поля (4.51) включає декілька вкладених циклів. Кожне з рівнянь, у свою чергу, є системою скінченно-елементних рівнянь великої розмірності. Розріджені матриці систем мають діагональний вигляд і стрічкову структуру. Для розв'язання систем використовують метод прогону в поєднанні з ітераційним багатокроковим методом Ньютона. Після отримання розв'язку

із заданою точністю для потенціалів (рівняння Пуассона) узгоджено розв'язують систему рівнянь (4.46)–(4.50) з розрахунком на кожному кроці часів релаксації й ефективної маси з урахуванням заселеності долин за відповідними апроксимаціями. При цьому використовується дводолинна модель енергетичних зон.

Вихідний струм ПТШ розраховують як нормальну складову струму до контакту стоку за відомими двовимірними розподілами концентрації електронів, напруженості електричного поля і рухливості за результатами розв'язання початкової системи рівнянь після отримання заданої точності у вузлах сітки. Якщо неможливо досягти заданої точності в межах ітераційних процесів (внутрішнього і зовнішнього циклів), здійснюють процедуру дроблення кроку триангулярної сітки.

Як тестову використовують структуру ПТШ із розмірами затвора $0,25 \times 100$ мкм, товщиною епітаксialного шару 0,1 мкм зі ступінчастим профілем легувальної домішки, з концентрацією донорів у каналі й напівізолювальній підкладці відповідно $5 \cdot 10^{17}$ і $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Інші розміри, параметри шарів і матеріалів ПТШ показано на рис. 4.28. Результати моделювання фізичних процесів у каналі досліджуваного транзистора подано на рис. 4.29 та 4.30.

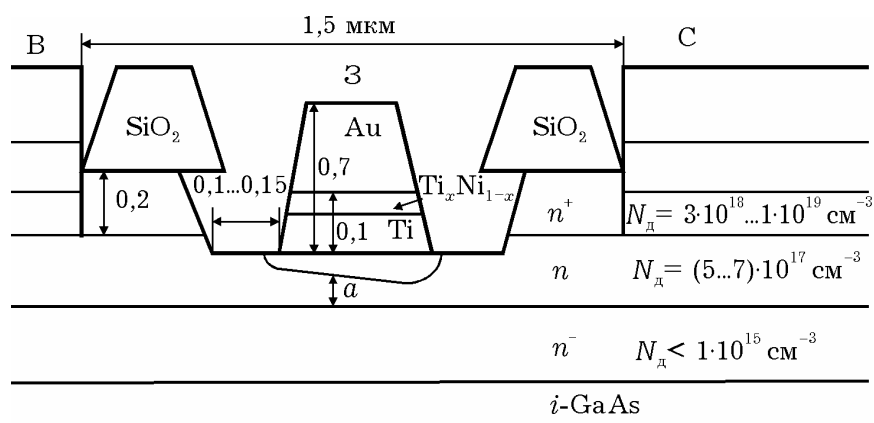


Рис. 4.28. Топологія модельованого субмікронного ПТШ

На рис. 4.29 та 4.30, де зображено двовимірні розподіли фізичних величин субмікронного ПТШ з довжиною затвора

0,25 мкм, затвор розміщений симетрично щодо координати $x = 0$.

Отримані результати відповідають такому електричному режиму на електродах транзистора: потенціал витоку дорівнює нулю, потенціали на затворі та стоці становлять відповідно мінус 1,0 В (з урахуванням висоти бар'єра Шоттки 0,8 і 4,0 В).

Як показують результати порівняння розрахунків і вимірювань [29] для подібної транзисторної структури з розміром затвора $0,3 \times 300$ мкм у короткоканальних структурах (довжина затвора менша від 0,5 мкм), на ВАХ області насичення струму стоку виражені не так яскраво, як у порівняно «довгих» структурах (довжина затвора більша за 0,5 мкм), що мають більш пологі характеристики.

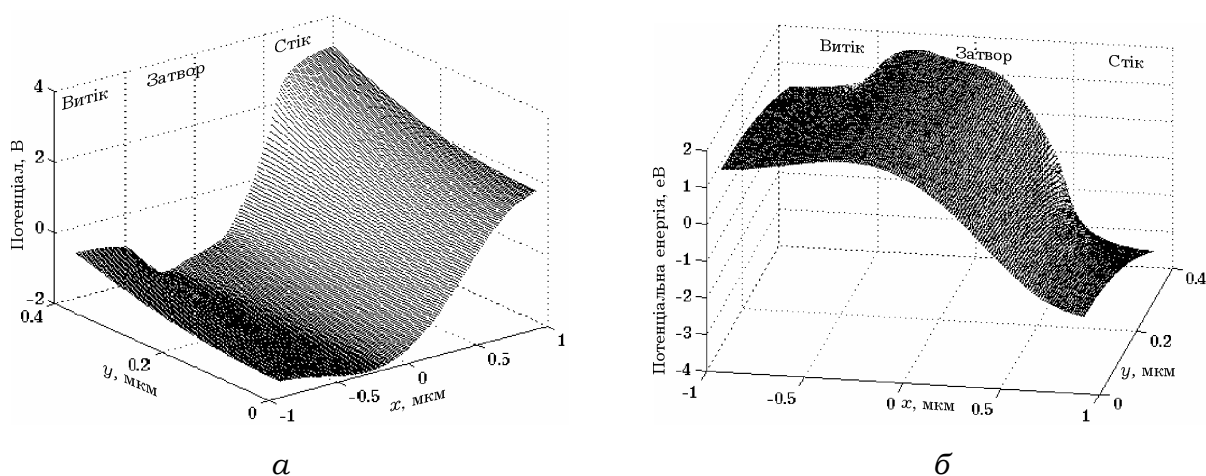


Рис. 4.29. Розподіл потенціалу (а) і потенціальної енергії (б) у структурі субмікронного ПТШ

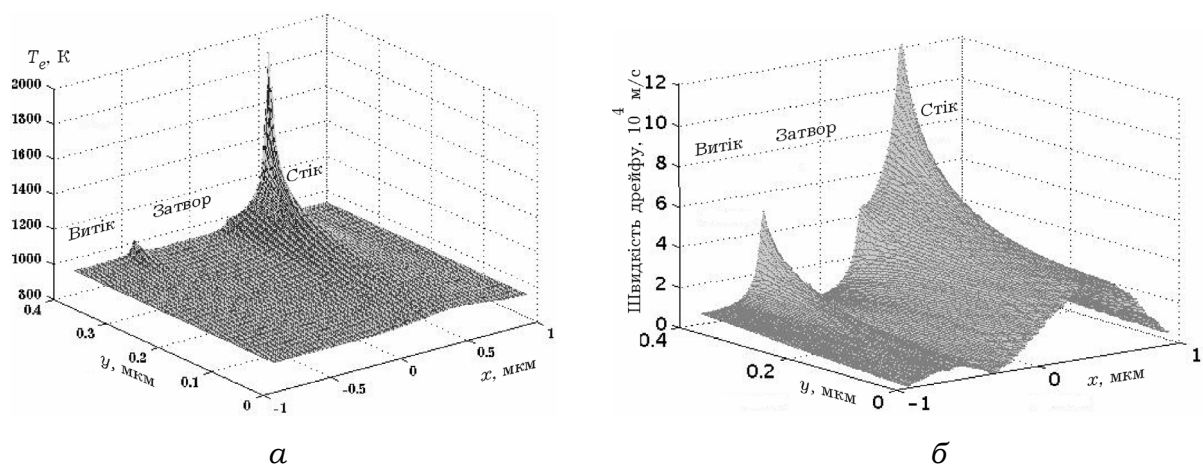


Рис. 4.30. Розподіл електронної температури (а) і поздовжньої швидкості (б) для субмікронного ПТШ з довжиною затвора 0,25 мкм

З погляду аналізу інтегральних характеристик транзистора це пов'язано з великими значеннями динамічної крутизни «коротких» структур. Порівняння проведених розрахунків з експериментом вказує на необхідність урахування в початковій системі релаксаційних рівнянь, оскільки значення розрахованих струмів стоку в пологій області вихідних характеристик ПТШ менше для всіх значень живильної напруги. Наведені дані підтверджують результати, отримані під час моделювання за кінетичною моделлю і в квазідвовимірному наближенні [69], згідно з якими ефект «сплеску» дрейфової швидкості приводить до збільшення середньої швидкості електронного газу, що, у свою чергу, приводить до зростання динамічної крутизни і вихідної провідності ПТШ.

4.6. МОДЕЛЮВАННЯ ЕФЕКТІВ ТРЕТЬОГО ВИМІРУ

4.6.1. Розподілені ефекти в польовому транзисторі Шотткі

Зі збільшенням ступеня інтеграції НВЧ ІС геометричні розміри їх компонентів можуть бути порівнянними з довжиною електромагнітної хвилі в матеріалі напівпровідника. При цьому розподілені ефекти можуть впливати на підсилювальні і шумові характеристики активних компонентів [33].

Для аналізу розподілених ефектів у затворній лінії субмікронного ПТШ розглянемо його структуру (рис. 4.31).

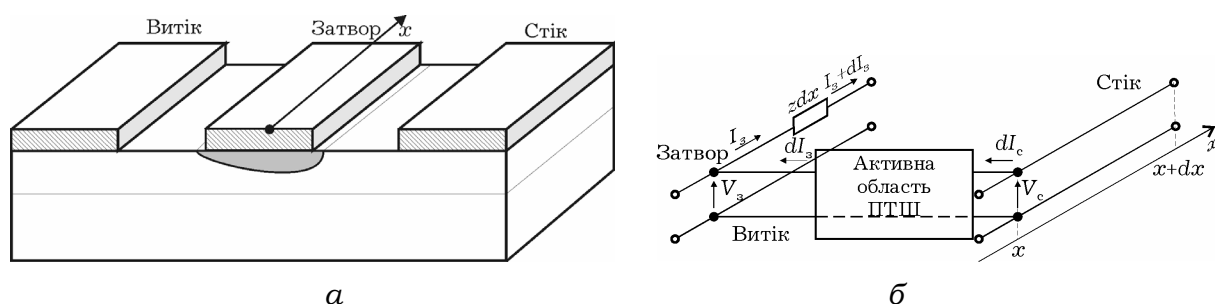


Рис. 4.31. Лінія затвора транзистора: структура ПТШ (а);
схемна модель диференціального відрізка лінії (б)

Для кількісного аналізу процесів поширення хвиль струму і напруги уздовж затворної лінії передачі розглянемо диферен-

ціальні рівняння (вісь x направлена від точки входу сигналу уздовж ширини транзистора):

$$\begin{aligned} dV_c(x) &= -I_s(x)zdx; \\ dI_s(x) &= y_{11}dxV_s(x) + y_{12}dxV_c; \\ dI_c(x) &= y_{21}dxV_s(x) + y_{22}dxV_c, \end{aligned} \quad (4.52)$$

де z – погонний опір затворної лінії передачі; y_{ik} ($i, k = 1, 2$) – параметри погонної матриці провідності активної області транзистора, тобто матриці провідності ПТШ (без урахування опору металізації затвора) одиничної ширини.

Перше рівняння (4.52) характеризує спад напруги на ділянці лінії затвора dx , два інших рівняння встановлюють зв'язок між струмами і напругою на чотириполюснику диференціальної секції транзистора.

Рівняння записані у припущенні еквіпотенціальності стоку і витоку (їх опори розтікання нехтовно малі) для трьох змінних: струму стоку $I_c(x)$ і затвора $I_s(x)$, а також напруга «затвор-витік» $V_s(x)$ (рис. 4.31). Вихідна напруга «стік-витік» – величина постійна і не залежить від x .

Перші два рівняння можна розглядати як систему рівнянь для визначення $V_s(x)$ і $I_s(x)$. Розділення змінних здійснюється повторним диференціюванням і наступною перехресною підстановкою. Позначаючи $\sqrt{zy_{11}} \equiv \dot{\gamma} = \alpha + j\beta$, отримаємо

$$\begin{cases} \frac{d^2 I_s(x)}{dx^2} = \gamma^2 I_s(x); \\ \frac{d^2 V_s(x)}{dx^2} = \gamma^2 V_s(x) + \gamma^2 \left(\frac{y_{12}}{y_{11}} \right) V_c. \end{cases}$$

Розв'язок рівнянь можна подати у формі

$$\begin{cases} I_s(x) = I_s^+ e^{-\gamma x} - I_s^- e^{\gamma x} = \frac{V_s^+}{Z_B} e^{-\gamma x} - \frac{V_s^-}{Z_B} e^{\gamma x}; \\ V_s(x) = V_s^+ e^{-\gamma x} + V_s^- e^{\gamma x} - \left(\frac{y_{12}}{y_{11}} \right) V_c. \end{cases}$$

Підставимо ці розв'язки в одне з початкових рівнянь першого порядку. Прирівнюючи доданки за однакових функцій, отримаємо зв'язок між двома парами сталих інтегрування

$$\frac{V_3^+}{I_3^+} = \frac{V_3^-}{I_3^-} = \frac{z}{\gamma} = \sqrt{\frac{z}{y_{11}}} \equiv Z_0,$$

де величина Z_0 за аналогією з довгими лініями відповідає комплексному значенню хвильового опору.

Ще дві сталі інтегрування можна знайти з умов $V_3(0) = V_{\text{BX}}$ і $I_3(W) = 0$, підставляючи їх у рівняння попередньої системи, отримаємо

$$V_3^\pm = \frac{[V_{\text{BX}} + (y_{12}/y_{11})V_c]e^{\pm\gamma W}}{\text{ch } \gamma W}.$$

У результаті вирази, що характеризують розподіл амплітуд напруги і струму, можна подати у такій формі:

$$I_3(x) = \frac{[V_{\text{BX}} + (y_{12}/y_{11})V_c] \text{sh } \gamma(W-x)}{Z_0 \text{ch } \gamma W};$$

$$V_3(x) = \frac{[V_{\text{BX}} + (y_{12}/y_{11})V_c] \text{ch } \gamma(W-x)}{\text{ch } \gamma W} - \left(\frac{y_{12}}{y_{11}}\right)V_c.$$

Отримані функції дозволяють встановити зв'язок амплітуд вхідного і вихідного струмів для транзистора в цілому з амплітудами напруги.

З останнього виразу для струму затвора $I_3(x)$ за $x = 0$ отримаємо

$$I_{\text{BX}} = I_3(0) = \frac{[V_{\text{BX}} + (y_{12}/y_{11})V_c]}{Z_0} \text{th } \gamma W.$$

Підставляючи $V_3(x)$ у третє рівняння початкової системи (4.52), інтегруванням за всією шириною затвора отримаємо вираз для повного струму стоку:

$$I_{\text{ВІХ}} = \int_0^W dI_c(x) = y_{21}W \left(\frac{\text{th } \gamma W}{\gamma W} \right) V_{\text{BX}} +$$

$$+ \left[y_{22}W + \frac{y_{21}y_{12}}{y_{11}}W \left(\frac{\text{th } \gamma W}{\gamma W} - 1 \right) \right] V_c.$$

Два останні рівняння зв'язку струмів $I_{\text{вх}}$ і $I_{\text{вих}}$ з напругою $U_{\text{вх}}$ і $U_{\text{вих}}$ дозволяють перейти до параметрів зосередженої моделі транзистора без урахування опору металізації затвора. Якщо замість погонних y -параметрів перейти до параметрів зосередженої моделі транзистора $Y_{ik}^c = y_{ik} W$, то результат можна подати у такій формі:

$$\begin{aligned} Y_{11} &= Y_{11}^c F; & Y_{12} &= Y_{12}^c F; & Y_{21} &= Y_{21}^c F; \\ Y_{22} &= Y_{22}^c F + \frac{Y_{12}^c Y_{21}^c - Y_{11}^c Y_{22}^c}{Y_{11}^c} (F - 1). \end{aligned}$$

де F – функція, яка визначає ступінь впливу розподілених ефектів на характеристики транзистора, $F \equiv \text{th } \gamma W / \gamma W$. Її аргумент зручно записати у вигляді $\gamma W = \sqrt{Z_g Y_{11}^c}$, де Z_g – повний опір металізації затвора.

Якщо спрощено вважати цей опір за активний (R_g), а провідність Y_{11}^c змодельовати провідністю послідовного з'єднання омичного опору (R_s), опору каналу R_k та ємності «затвор–витік» C_{gs} (що зазвичай досить добре виконується в широкому діапазоні частот), то

$$\gamma W = \sqrt{\frac{R_g}{(R_k + R_s - i / \omega C_{gs})}}.$$

Частотні залежності F і Z_0 для значень $R_g = 2$ Ом; $R_k = 25$ Ом; $R_s = 8$ Ом; $C_{gs} = 0,1$ пФ (на 100 мкм ширини транзистора) зображено на рис. 4.32. Криві 1...5 відповідають значенням ширини затвора 100...500 мкм. Зменшення модуля F спостерігається на частотах вище 10 ГГц, при цьому відбувається і погіршення параметрів передачі транзистора. Слід зазначити, що найбільший фазовий зсув, викликаний розподіленими ефектами, відповідає області частот, де стають рівними активна й реактивна складові провідності Y_{11}^c .

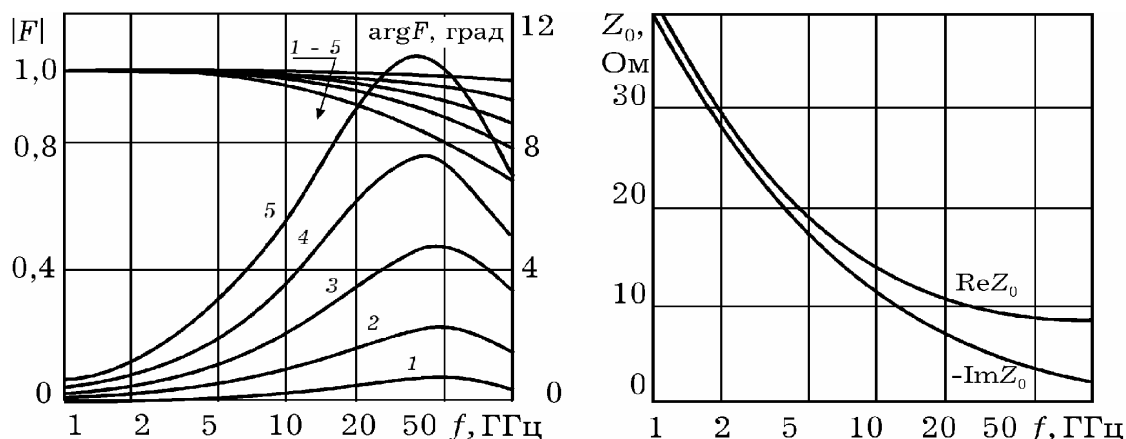


Рис. 4.32. Вплив розподілених ефектів на параметри транзистора

Як критерій відсутності розподілених ефектів можна розглядати нерівність $\gamma W \ll 1$. Якщо розподілені ефекти виражені слабо, можна використовувати наближене співвідношення $\text{th } \gamma W / \gamma W \approx 1 - (\gamma W)^2 / 3$.

Отримані вирази для розрахунку Y -параметрів транзистора досить прості й компактні, вони можуть бути використані з моделлю будь-якого рівня.

Розглянуті розподілені ефекти мають впливати не лише на підсилювальні, але й шумові властивості. Активна область ПТШ описується схемною моделлю із зосередженими параметрами, що враховує властивості лінії на напівпровідниковій підкладці, в якій відбувається дрейф гарячих носіїв.

Електромагнітна хвиля, що поширюється, локалізується в області просторового заряду під затвором, що є низькопровідною областю, близькою за своїми властивостями до діелектрика. Проникнення поля у збіднений шар підкладки обмежується високопровідним шаром каналу.

У затворній лінії передачі, що має помітний активний опір, відбувається загасання сигналу і генерація теплових шумів, що підвищує коефіцієнт шуму всього транзистора.

4.6.2. Аналіз польового транзистора Шотткі з розподіленими параметрами в часовій області

Розширення робочого діапазону субмікронних транзисторів у міліметрову область і швидкодії до пікосекундного діапазону зумовлює необхідність враховувати розподілені ефекти уздовж третьої координати – ширини затвора [88–90] та аналізу їх впливу на часові характеристики.

Для моделювання перехідних процесів у мікрохвильових польових структурах у часовій області, що складаються з лінійних і нелінійних компонентів з розподіленими параметрами, можна використовувати метод, описаний у статті [91], де компоненти подані характеристичними моделями в часовій області, а для зменшення обчислювальних витрат замінюються схемними моделями. Потім моделі компонентів додатково визначаються граничними значеннями напруги і струмів, пов'язаних з поширенням сигналу уздовж обраного напрямку, тим самим враховується вплив геометричних розмірів польової структури на величину сигналу. Розподілену аналітичну схемну модель, що дозволяє розраховувати Y -матрицю транзистора, імпедансні та передавальні характеристики з урахуванням загасання і зміни фази сигналу в лінії затвора в частотній області, розроблено у роботі [33]. Для кіл міліметрового діапазону, що працюють в імпульсному режимі, являє також інтерес інформація про форму сигналу, що пов'язано з можливістю розраховувати розподіли струмів і напруги уздовж лінії затвора в часовій області. Схематично таку лінію зображено на рис. 4.33.

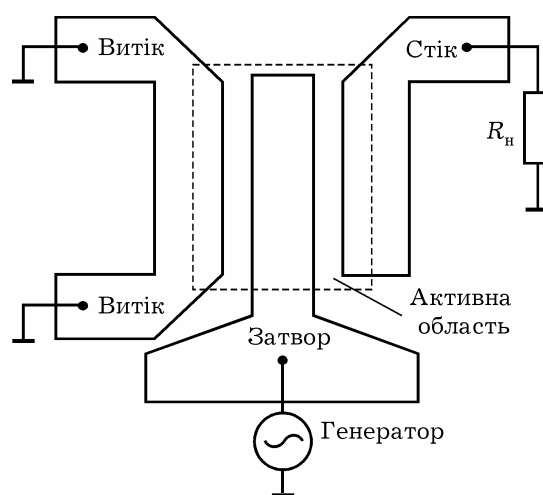


Рис. 4.33. Лінія передачі затвора транзистора

Аналіз транзисторної структури уздовж третьої координати в часовій області пов'язаний з розробкою моделей, параметри

яких у поперечних і поздовжньому напрямках залежать від часу. Один із підходів пов'язаний з дискретизацією структури уздовж ширини транзистора на відрізки ΔW (на рис. 4.34 уздовж координати x) і з аналізом параметрів схемної моделі транзистора в поперечній до напрямку поширення сигналу площині в часовій області, використовуючи схемну модель із зосередженими параметрами. За відомими значеннями струму і напруги на початку відрізка лінії ΔW розв'язують хвильові рівняння для струму і напруги в лінії. Як початкові умови задають струми і напруги на електродах, отримані після розв'язання системи вузлових диференціальних рівнянь у часовій області, тобто використовується декомпозиція системи, коли по черзі розв'язують систему рівнянь транзистора в поперечній площині (без лінії затвора) і хвильові рівняння для лінії затвора в часовій області. Стала поширення і хвильовий опір лінії визначаються її параметрами у поперечній площині.

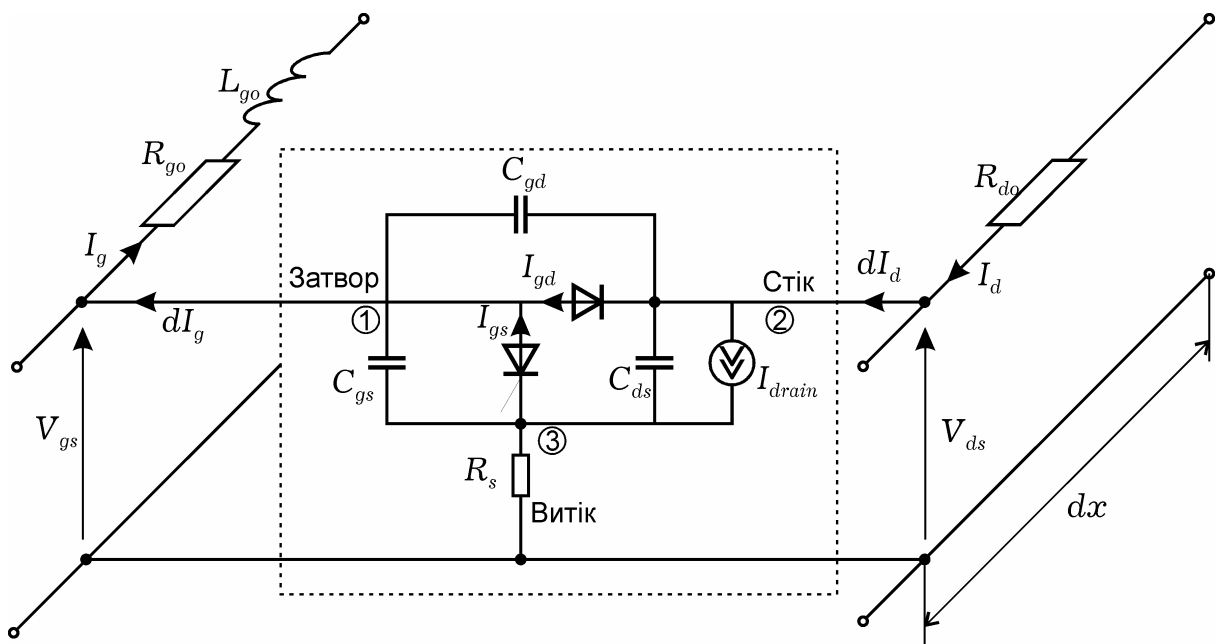


Рис. 4.34. Нелінійна модель диференціального відрізка активної лінії передачі: C_{gs} , C_{gd} , C_{ds} – вхідна, прохідна і вихідна ємності відповідно; I_{gd} , I_{gs} – струми через діоди «затвор-стік» і «затвор-витік» відповідно; I_{drain} – залежне джерело струму, що описує нелінійну залежність струму стоку від напруги на затворі V_{gs} і стоку V_{ds} ; R_s – опір контакту витіку; R_{go} , L_{go} і R_{do} – погонні параметри затворної і стокової ліній відповідно

Використовуючи закон Кірхгофа для струмів, отримаємо систему рівнянь, що описують поведінку схеми в часовій області:

$$\begin{aligned} - \text{вузол 1: } & I_{Cgd} - I_{gd} - I_{gs} + I_{Cgs} + I_{Rg} = 0; \\ - \text{вузол 2: } & I_{Rd} - I_{Cds} - I_{Cgd} + I_{drain} - I_{Rn} + I_{gd} = 0; \\ - \text{вузол 3: } & I_{Cds} + I_{gs} - I_{Cgs} - I_{drain} + I_{Rs} = 0. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Використовуючи залежність $I = CdU/dt$, запишемо струми через ємності:

$$\begin{aligned} C_{gd} \frac{dU_{gd}}{dt} - I_{gd} - I_{gs} + C_{gs} \frac{dU_{gs}}{dt} + I_{Rg} &= 0; \\ I_{Rd} - C_{ds} \frac{dU_{ds}}{dt} - C_{gd} \frac{dU_{gd}}{dt} + I_{drain} - I_{Rn} + I_{gd} &= 0; \\ C_{ds} \frac{dU_{ds}}{dt} + I_{gs} - C_{gs} \frac{dU_{gs}}{dt} - I_{drain} + I_{Rs} &= 0. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Замінімо напругу на елементах різницями відповідних вузлових потенціалів:

$$U_{gs} = V_2 - V_4; \quad U_{gd} = V_3 - V_2; \quad U_{ds} = V_4 - V_3. \quad (4.55)$$

Підставивши значення (4.55) у систему (4.54), отримаємо таку систему рівнянь:

$$\begin{aligned} & C_{gd} \frac{d(V_3 - V_2)}{dt} + C_{gs} \frac{d(V_2 - V_4)}{dt} = \\ & = I_{gd} \{V_3 - V_2\} + I_{gs} \{V_2 - V_4\} - I_{Rg}; \\ & -C_{ds} \frac{d(V_4 - V_3)}{dt} - C_{gd} \frac{d(V_3 - V_2)}{dt} = \\ & = I_{Rn} - I_{drain} \{V_2 - V_4, V_4 - V_2\} - I_{gd} \{V_3 - V_2\} - I_{Rd}; \\ & C_{ds} \frac{d(V_4 - V_3)}{dt} - C_{gs} \frac{d(V_2 - V_4)}{dt} = \\ & = I_{drain} \{V_2 - V_4, V_4 - V_2\} - I_{Rs} - I_{gs} \{V_2 - V_4\}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Оскільки вузлові потенціали V_1 і V_5 є задавальними джерелами напруги $U_{in}(t)$ і E_c , то система (4.56) може бути подана у такому вигляді:

$$\begin{aligned} & C_{gd} \frac{d(V_3 - V_2)}{dt} + C_{gs} \frac{d(V_2 - V_4)}{dt} = I_{gd} \{V_3 - V_2\} + I_{gs} \{V_2 - V_4\} - I_{Rg}; \\ & -C_{ds} \frac{d(V_4 - V_3)}{dt} - C_{gd} \frac{d(V_3 - V_2)}{dt} = I_{Rn} - I_{drain} \{V_2 - V_4, V_4 - V_2\} - I_{gd} \{V_3 - V_2\} - I_{Rd}; \end{aligned}$$

$$C_{ds} \frac{d(V_4 - V_3)}{dt} - C_{gs} \frac{d(V_2 - V_4)}{dt} =$$

$$= I_{drain} \{V_2 - V_4, V_4 - V_2\} - I_{Rs} - I_{gs} \{V_2 - V_4\}.$$

У матричній формі:

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{B},$$

де

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} C_{gs} - C_{gd} & C_{gd} & -C_{gs} \\ C_{gd} & C_{ds} - C_{gd} & -C_{ds} \\ -C_{gs} & -C_{ds} & C_{gs} + C_{ds} \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} I_{gd} \{V_3 - V_2\} + I_{gs} \{V_2 - V_4\} - \frac{V_2 - U_{in}(t)}{R_g} \\ \frac{V_3}{R_n} - I_{drain} \{V_2 - V_4, V_4 - V_2\} - I_{gd} \{V_3 - V_2\} - \frac{V_5 - V_3}{R_d} \\ I_{drain} \{V_2 - V_4, V_4 - V_2\} - \frac{V_4}{R_s} - I_{gs} \{V_2 - V_4\} \end{bmatrix}.$$

Розв'язання цієї системи пов'язане з необхідністю враховувати погану обумовленість матриці коефіцієнтів \mathbf{M} . У цьому разі слід використовувати адаптивний підхід, пов'язаний з аналізом власних частот системи [92].

Для аналізу часових характеристик уздовж затворної лінії передачі (уздовж третьої координати транзистора) і визначення розподілу струмів і напруги уздовж координати x необхідно систему рівнянь, що дозволяє знайти струми і напруги в поперечній до напрямку поширення сигналу площині, доповнити системою хвильових рівнянь. Для відрізка лінії можна записати систему телеграфних рівнянь у часовій області з погонними параметрами лінії затвора у такому вигляді:

$$-\frac{\partial V}{\partial x} = Ri + L \frac{\partial i}{\partial t}; \quad -\frac{\partial i}{\partial x} = GV + C \frac{\partial V}{\partial t},$$

де параметри R і L визначаються опором та індуктивністю металізації затвора, а G і C відповідно вихідною провідністю і вхідною ємністю транзистора.

Розділення змінних у телеграфних рівняннях досягають повторним диференціюванням з перехресною підстановкою і переходом до хвильових рівнянь для струму і напруги:

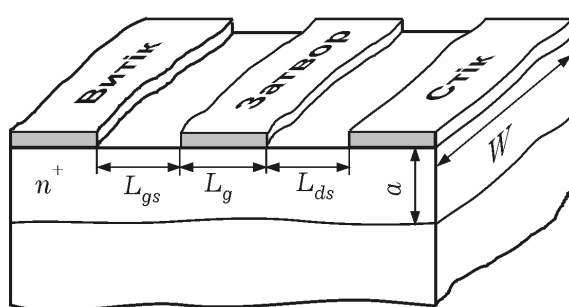
$$\nabla^2 V - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} = 0; \quad \nabla^2 i - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 i}{\partial t^2} = 0.$$

Якщо, у найпростішому випадку, сигнал на вході гармонічний або якщо його можна подати у вигляді скінченного числа гармонік, то задачу можна звести до розв'язання хвильових рівнянь у комплексній області для кожної з гармонік.

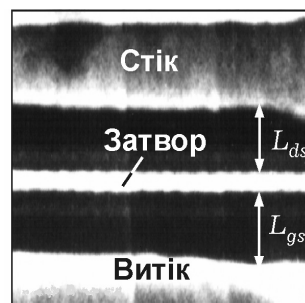
4.6.3. Моделювання розмірних ефектів і технологічних неоднорідностей

У реальних структурах (активних і пасивних) спостерігаються неоднорідності, що виникають у технологічному процесі під час виготовлення. Їх аналіз актуальний, оскільки, зважаючи на субмікронні розміри, технологічні неоднорідності можуть бути порівнянні з розмірами структури (рис. 4.35). Врахувати їх можна, наприклад, подаючи транзистор у вигляді деякої дискретної структури уздовж третьої координати (ширина затвора). Тоді кожен із секцій можна буде описувати своїм набором фізико-топологічних параметрів і, відповідно, Y -матрицею, тобто структуру можна подати у вигляді паралельно сполучених чотириполіусників:

$$Y = \sum_{i=1}^n [Y_i].$$



а



б

Рис. 4.35. Топологія транзистора з технологічними неоднорідностями (а) і фрагмент фотографії (б) на рис. 4.1, б

Параметри (геометричні, фізичні) у кожній секції (рис. 4.36) можна задавати або детермінованою функцією, або випадково (за відповідним законом розподілу – нормальним, рівномірним тощо, використовуючи метод Монте-Карло). Після отримання результуючої Y -матриці високочастотні параметри розраховуються відомими методами теорії електронних кіл.

Актуальним також є аналіз результатів теоретичних та експериментальних досліджень впливу морфології омичних контактів на НВЧ параметри GaAs польових транзисторів з бар'єром Шотткі [35; 36].

З підвищенням ступеня інтеграції монолітних інтегральних схем, а також з розширенням робочого частотного діапазону польових транзисторів з бар'єром Шотткі в міліметрову область елементи їх топології наближаються до субмікронних розмірів. При цьому до пасивних областей транзистора висувають дедалі жорсткіші вимоги, насамперед до величини питомого контактного опору ρ_k , теплової стабільності, радіаційної стійкості, а також повторюваності геометричних розмірів структури у процесі виготовлення. Зростають вимоги до морфології поверхні контактів, однорідності розподілу електричних параметрів кон-

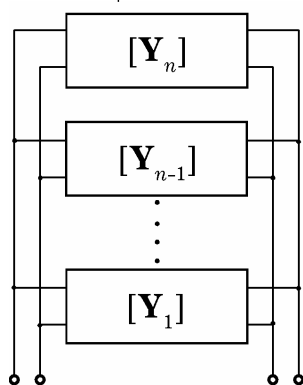


Рис. 4.36. Подання транзистора у вигляді паралельних чотириполюсників

тактів по його площині. Цим зумовлена потреба в удосконаленні технології, зокрема омичних контактів, а також моделювання розмірних ефектів і фізико-топологічних неоднорідностей у ПТШ, зумовлених структурою самих контактів.

Для дослідження впливу технологічних неоднорідностей використовували тестову структуру ПТШ з топологією і геометричними параметрами, наведеними на рис. 4.28.

Транзистори виготовлені на епітаксіальних структурах GaAs, вирощених газофазною епітаксією металоорганічних сполук на напівізолювальній підкладці з буферним шаром.

Топологія стоку і витоку у вигляді омичних контактів і затвора у вигляді бар'єрного контакту формувалися в процесі літографії з середнім значенням довжини затвора в межах 0,3 мкм і шириною 200 мкм. Такі розміри забезпечували використанням електронно-променевої літографії для отримання робочої частоти транзистора близько 12 ГГц.

Для дослідження впливу параметрів контактів, зокрема з різними розмірами зерен – 1,0...1,5 мкм і близько 3,0 мкм, використовували дві тестові структури транзистора [35].

Для моделювання неоднорідностей застосовували секціоновану модель уздовж третьої координати ПТШ. В основі такої моделі лежить дискретизація структури ПТШ уздовж ширини затвора W . Кожний з n елементарних транзисторів шириною ΔW має індивідуальний набір геометричних параметрів: товщину епітаксiального шару, довжину затвора, міжелектродні відстані «витік–затвор» і «затвор–стік», товщину шару металізації затвора. Подібні моделі використовувалися для дослідження впливу технологічних неоднорідностей структур з розмірами затвора 0,5 мкм [36; 93; 94].

Зі зменшенням довжини затвора вплив неоднорідностей стає помітнішим, проте через малі розміри це передбачає вдосконалення методів дослідження. Зокрема, вихідна система рівнянь для аналізу нестационарних ефектів має бути доповнена релаксаційними рівняннями для каналу і підкладки в наближенні часу релаксації.

Експериментальні залежності, наведені на рис. 4.37 для транзисторів з різною довжиною затвора для кімнатної температури кристалічної ґратки і в умовах охолодження до 80 К, підтверджують як залежність шумової температури ПТШ від електричного режиму, так і від неоднорідностей контактів, пов'язаних з їх морфологією. Це підтверджує необхідність урахування неоднорідності субмікронних структур під час моделювання для пошуку шляхів оптимізації параметрів і досягнення мінімального коефіцієнта шуму. Окрім адекватного

моделювання технологічних неоднорідностей потрібно визначати оптимальні геометричні та електрофізичні параметри (міжелектродні відстані, товщину шарів, їх концентрації тощо) й електричний режим.

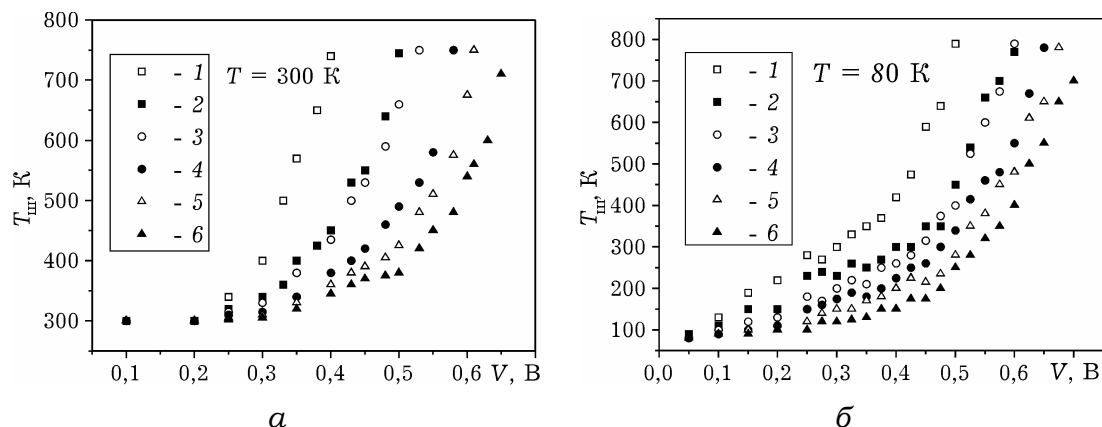


Рис. 4.37. Залежність шумової температури каналу від напруги на активній області зразка на частоті 10 ГГц за температури 300 К (а) та 80 К (б):

1, 2 – $L_d = 0,2$ мкм; 3, 4 – $L_d = 0,6$ мкм; 5, 6 – $L_d = 1,0$ мкм;
1, 3, 5 – стандартна технологія; 2, 4, 6 – покращена технологія

Методика моделювання випробувана на дослідженні впливу на параметри ПТШ неоднорідностей опору витоку і стоку, зумовлених різним питомим контактним опором і глибиною проплавлення омичних контактів, що визначається морфологією. При цьому параметри активної області транзистора вибиралися фіксованими, тобто задавалися як деякі середні ефективні значення.

Транзистор з шириною затвора W можна подати у вигляді еквівалентного чотириполіусника, описуваного малосигнальною схемною моделлю із зосередженими параметрами, визначеними на основі фізико-топологічної моделі, що враховує нестационарні ефекти. Параметри чотириполіусника у вигляді матриці провідності та матриці розсіяння розраховуються відомими методами аналізу електронних схем. Очевидно, що повна структура транзистора є ланцюжком паралельно сполучених чотириполіусників. Шумові параметри окремих секцій і транзистора в цілому моделювалися на основі матриці спектральної густини потужності шуму (τ -матриці) за умови адитивності шумів структури і припущення, що немає кореляції між шумами окремих секцій.

Параметри, які характеризують неоднорідності кожної секції, задаються детермінованою функцією, якщо відомий закон їх зміни уздовж ширини затвора, або ж як випадкові величини методом Монте-Карло.

Довжина вибірки випадкових чисел за заданим законом розподілу визначається кількістю розбиття структури транзистора, тобто кількістю секцій. Результируюча матриця провідності ланцюжка є сумою матриць провідності елементарних секцій. Сумарна Y -матриця за відомим співвідношенням перераховується в матрицю розсіяння: $[S] = ([I] - [Y])([I] + [Y])^{-1}$.

Такий підхід реалізований у програмі моделювання ПТШ з урахуванням топологічних неоднорідностей. Як приклад для розрахунків досліджувалися структури серійних ПТШ з такими параметрами: $L_{gs} = 0,8...3,8$ мкм – відстань «витік–затвор»; $L_z = 0,3$ мкм – середнє значення довжини затвора; $L_{gd} = 0,8...3,8$ мкм – відстань «затвор–стік»; $h = 0,6$ мкм – висота металізації затвора; $a = 0,11$ мкм – середнє значення товщини каналу; $\rho_k = 10^{-4}...10^{-7}$ Ом·см² – питомий опір омічних контактів; $b = 0,1...0,3$ мкм – глибина проплавлення контактів.

Слід зазначити, що значний розкид (більше 50 %) величин L_{gs} і L_{gd} пояснюється тим, що за умов неоптимізованої технології формування омічних контактів розмір окремих зерен, рекристалізованих з розплаву, може досягати 3 мкм. У результаті опір як з боку витіку, так і з боку стоку може зростати більш ніж на порядок. Кількість секцій вибиралася так, щоб ширина кожної становила не більше 2 мкм, тобто ланцюжок складався не менше ніж зі 100 елементарних транзисторів.

На рис. 4.38 наведено результати розрахунків коефіцієнта посилення потужності K_P і температури шуму $T_{ш}$ ПТШ на частоті 12 ГГц без урахування і з урахуванням неоднорідностей з максимальною дисперсією 50 %, а також результати вимірювань середньостатистичних значень цих параметрів на транзисторах, в яких стік і витік у вигляді омічних контактів

сформовані за типовою серійною технологією і за покращеною технологією, де розміри рекристалізованих зерен не перевищують 0,1 мкм. Як видно з рис. 4.38, K_P зменшується на 0,8 дБ, а $T_{ш}$ зростає на 23 К, якщо використовувати запропоновану модель і врахувати флуктуації в пасивних областях ПТШ з наведеною дисперсією параметрів.

Ці розрахунки значною мірою збігаються з результатами вимірювань НВЧ транзисторів на робочій частоті 12 ГГц. Так, для транзисторів з покращеною морфологією спостерігається збільшення K_P на 0,6 дБ і зменшення $T_{ш}$ на 13 К за $T_0 = 100$ К і на 10 К за $T_0 = 340$ К відповідно, де T_0 – температура, за якої вимірювали параметри НВЧ.

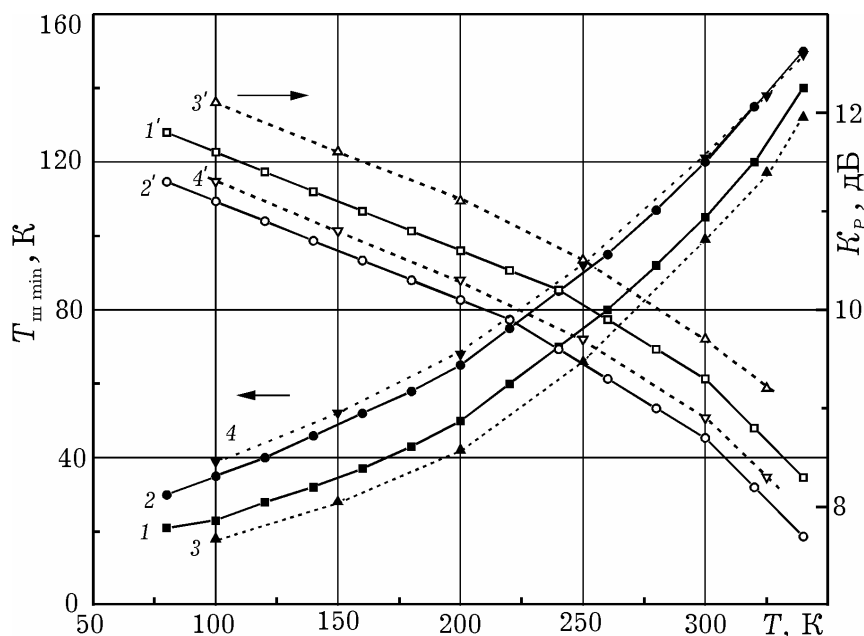


Рис. 4.38. Температурні залежності K_P і $T_{ш}$ на частоті 12 ГГц:

- 1, 1' – ПТШ з покращеною морфологією омичних контактів;
- 2, 2' – серійний ПТШ, виготовлений за серійною технологією;
- 3, 3' – розраховані параметри моделі ПТШ без урахування неоднорідностей;
- 4, 4' – розраховані параметри моделі ПТШ з урахуванням неоднорідностей

Слід зауважити, що розраховані параметри ПТШ за запропонованою моделлю без урахування впливу неоднорідностей кращі, ніж для реального транзистора. Це легко пояснюється тим, що навіть якщо технологія вдосконалена максимально, у реальних приладах спостерігатиметься вплив неоднорідностей.

Окрім цього, за вдосконаленої технології пасивних областей субмікронних структур завжди спостерігається вплив фізико-топологічних неоднорідностей в активній області ПТШ.

Проведені дослідження показують також, що температура шуму $T_{\text{ш}}$ зі зниженням температури транзистора від 300 до 80 К зменшується приблизно у чотири рази для типових транзисторів та в п'ять разів для транзисторів з покращеною морфологією стоку і витoku і досягає значень менше 20 К. Величина K_{yP} при цьому збільшується приблизно на 2,5 дБ. Аналогічний характер температурних залежностей K_{yP} і $T_{\text{ш}}$ підтверджується результатами моделювання. Здебільшого це можна пояснити тим, що в ПТШ з покращеною морфологією омічних контактів в умовах охолодження за рахунок зменшення впливу термопольової емісії $\rho_{\text{к}}$ матиме менший вплив на параметри приладу.

Рекомендована література: [27]; [28]; [29]; [33]; [35]; [36]; [62]; [63]; [64]; [65]; [66]; [67]; [68]; [69]; [70]; [71]; [72]; [73]; [74]; [75]; [76]; [77]; [78]; [79]; [80]; [81]; [82]; [83]; [84]; [85]; [86]; [87]; [88]; [89]; [90]; [91]; [92]; [93]; [94].

5. ГЕТЕРОСТРУКТУРНІ ПОЛЬОВІ ТРАНЗИСТОРИ

5.1. ЗАГАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ

Поліпшення параметрів ПТШ може бути досягнуте збільшенням концентрації носіїв у каналі за рахунок підвищення рівня легування, але при цьому через збільшення домішкового розсіювання зменшується рухливість і, відповідно, швидкість носіїв. Щоб істотно знизити домішкове розсіювання і підвищити рухливість, використовують гетеропереходи, в яких просторово розділені області легування з іонізованими донорними атомами і породжені ними електрони. Одним зі способів реалізації цієї ідеї є використання гетероконтакту широкозонного високолегованого напівпровідника з нелегованим вузькозонним. Відмінність енергій електронної спорідненості спричиняє розрив дна зони провідності і, як наслідок, перехід електронів з широкозонного матеріалу в нелегований

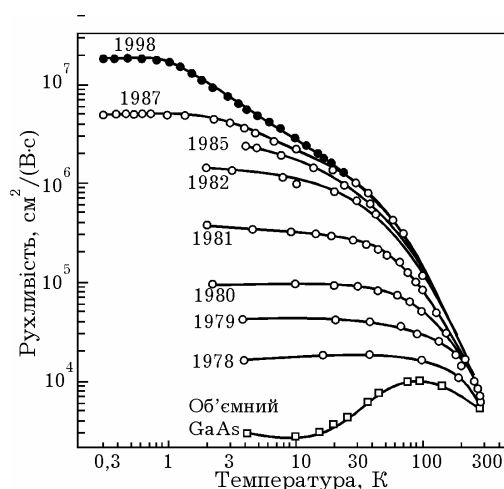


Рис. 5.1. Прогрес, досягнутий за 20 років у підвищенні рухливості електронів у двовимірній електронній системі модульовано-легованих гетероструктур GaAs/AlGaAs [95]

вузькозонний. Наявність просторового заряду електронів викликає вигин зони провідності та підвищення концентрації електронів у створюваній потенціальній ямі. Найбільш вивченими і технологічно відпрацьованими є гетероструктури GaAs/AlGaAs. Рухливість електронів, що перейшли в шар вузькозонного матеріалу і створюють там двовимірний електронний газ, досягає за кімнатної температури значень, характерних для чистого матеріалу (рис. 5.1).

Велика концентрація електронів у тонкому шарі, висока рухливість, а також можливість керувати концентрацією носіїв у каналі сприяли швидкій розробці нового типу польових

транзисторів на двовимірному електронному газі. Перші польові транзистори, що використовують гетероперехід GaAs/AlGaAs, із крутизною майже у три рази більшою, ніж крутизна аналогічного GaAs ПТШ, були описані в 1980 р. [96]. Ці транзистори отримали назву *HEMT* (*High Electron Mobility Transistor*). У літературі трапляються також назви *TEGFET* (*Two Dimensional Electron FET*) або *SDHFET* (*Selectively Doped Heterostructure FET*). Останнім часом переважно використовують більш загальну назву польових транзисторів на основі гетероструктур – ГСПТ (гетероструктурний польовий транзистор) або *HFET* (*Heterostructure Field Effect Transistor*). Схематично такий транзистор зображено на рис. 5.2.

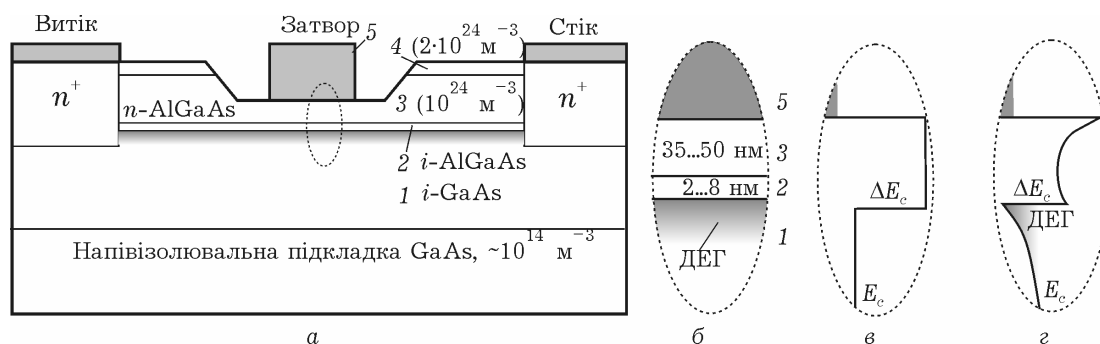


Рис. 5.2. Поперечний переріз ГСПТ (а) з характерною товщиною шарів (б): 1 – нелегований GaAs; 2 – спейсер – нелегований шар AlGaAs; 3 – бар'єрний шар – n-AlGaAs; 4 – контактний шар – n⁺-GaAs – та потенціальний профіль дна зони провідності вихідних матеріалів (в) у рівноважному стані (г)

Основним структурним «елементом» у ГСПТ на основі GaAs є область двовимірному електронного газу (ДЕГ). Вона формується в зоні гетеропереходу між бар'єрним $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -шаром і нелегованим каналним GaAs-шаром. Ширина забороненої зони для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ вища, ніж для GaAs (див. рис. 2.14), і в області гетеропереходу дно зони провідності GaAs може опинитися нижче за рівень Фермі – утворюється потенціальна яма (рис. 5.2, г).

У ГСПТ на основі GaAs бар'єрний шар легують кремнієм (тобто отримують високолегований n-Al_xGa_{1-x}As шар), щоб забезпечити джерело вільних електронів. Перехід електронів до потенціальної ями з області бар'єрного шару викликаний тим, що через різні енергії електронної спорідненості GaAs і Al_xGa_{1-x}As в області їх контакту утворюється досить сильне

електричне поле, що моделюється зазвичай розривом забороненої зони ΔE_c , яке ініціює перехід вільних електронів з $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ до потенціальної ями. Часто обирають частку $\text{Al } x \approx 0,3$, за якої $\Delta E_c \approx 0,3$ еВ. Отже, в каналному GaAs -шарі безпосередньо під гетеропереходом утворюється тонкий шар просторового заряду з високою густиною і рухливістю вільних електронів, який і називають двовимірним електронним газом.

Між бар'єрним і каналним шарами формують спейсер (*spacer*) – шар високоомного нелегованого AlAs або $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Основне призначення цього тонкого (1...3 нм) шару – запобігти розсіянню носіїв у каналі на межі з гетеропереходом. Верхня частина бар'єрного шару утворює з металом затвора бар'єр Шотткі, котрий, як і в звичайному ПТШ, керує провідністю каналу. Часто в бар'єрному шарі формують область з підвищеною концентрацією Si (δ -легування), n^+ - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ шар для поліпшення омичних контактів стоку і витоку й збільшення концентрації носіїв у каналі.

Структури сучасних ГСПТ досить різноманітні, вони можуть істотно розрізнятися за кількістю шарів, типом їх матеріалу, ступенем легування та іншим параметрам. На рис. 5.3, а зображено структуру двоперехідного транзистора, в якому канал утворюється в шарі нелегованого арсеніду галію завтовшки 30...50 нм між двома шарами більш широкозонного n^+ - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. В електронному газі, обмеженому потенціальними бар'єрами з двох боків, квантові властивості 2ДЕГ проявляються ще більшою мірою, ніж у попередній конструкції.

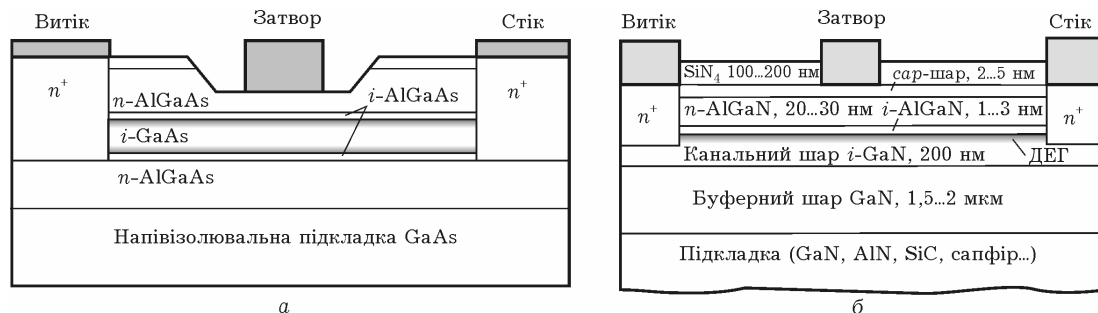


Рис. 5.3. Варіанти структур двоперехідного арсенідгалієвого ГСПТ (а) і гетероструктурного $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (б) транзисторів

Перспективними для використання останнім часом вважають нітриди галію та алюмінію. Найбільш технологічно освоєні структури на гетеропереходах GaN/Al_xGa_{1-x}N. У монокристалічному нелегованому GaN рухливість електронів провідності виявляється досить високою – близько 0,2 м²/(В·с) за кімнатної температури. Розрив дна зони провідності пари GaN та Al_xGa_{1-x}N істотно більший, ніж у гетеропереході GaAs/Al_xGa_{1-x}As, і становить близько 0,8 еВ, тому електростатичне поле в області контакту ще сильніше, а концентрація вільних електронів, що перейшли з Al_xGa_{1-x}N до потенціальної ями GaN, може бути істотно вищою. Крім того, в області контакту GaN і Al_xGa_{1-x}N (або AlN) через незбіжність періоду їх кристалічних ґраток утворюється механічна напруга, оскільки ж кристали AlN і GaN мають сильний ступінь поляризації, виникає п'єзоефект, який стимулює додатковий перехід носіїв у канал. У результаті концентрація електронів провідності в області ДЕГ може перевищувати 10¹³ см⁻². Зазначимо, що п'єзоефект настільки великий, що його одного часто вистачає для забезпечення необхідної концентрації носіїв у каналі. Так, якщо в ГСПТ на основі GaAs бар'єрний шар обов'язково легують, щоб забезпечити джерело вільних електронів, то для нітриду галію можна використовувати і нелегований бар'єрний шар Al_xGa_{1-x}N. Проте зазвичай бар'єрний шар у більшості GaN-структур легований. Поєднання високої рухливості й концентрації носіїв у каналі в широкій забороненій зоні (близько 3,4 еВ за кімнатної температури) зумовлює унікальні частотні й потужнісні властивості GaN ГСПТ.

Різних варіантів працюючих транзисторів досить багато. Найбільш узагальнену структуру GaN ГСПТ зображено на рис. 5.3, б. Для мінімізації впливу поверхневих станів на ГСПТ поверх бар'єрного шару формують сар-шар (легований або нелегований GaN, AlN, AlGaIn), а також пасивувальний шар, наприклад Si₃N₄ (останній характерний для будь-яких польових транзисторів). Канальний шар вирощують на товстому нелегованому або компенсованому буферному шарі – високоомному

GaN-шарі, в якому концентрація вільних носіїв становить менше 10^{13} см^{-3} , фактично як і у власному напівпровіднику. З технологічного погляду буферний шар забезпечує під час епітаксії плавний перехід від підкладки до досконалої структури каналу. Часто структура буферного шару виявляється досить складною – в ній формують декілька різних шарів із зворотними переходами, надґратками тощо. Основна вимога до підкладки, особливо для потужних транзисторів, – низька електропровідність і висока теплопровідність поряд з прийнятими механічними і структурними властивостями. Найбільш поширені матеріали підкладок – сапфір, карбід кремнію, кристалічний кремній з орієнтацією ґраток (111), а також GaN і AlN.

Можливості нітридгалієвих транзисторів показано на рис. 5.4, а саме стокові характеристики [97], що відзначаються більш високою напругою і густиною струму стоку.

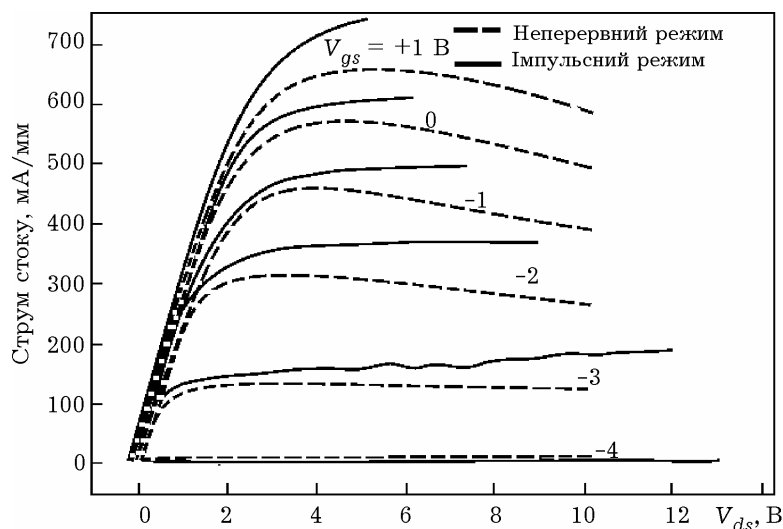


Рис. 5.4. Вольт-амперні характеристики нітридгалієвого ГСПТ, зображеного на рис. 5.3, б, виміряні в імпульсному (суцільні лінії) і неперервному (штрихові лінії) режимах

5.2. КІНЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРНИХ ПОЛЬОВИХ ТРАНЗИСТОРІВ

Моделюванню ГСПТ присвячено велику кількість робіт. Кінетичні моделі, що дозволяють оцінити характеристики приладу, розглядалися у статтях [98; 99], у роботі [100] наведено

двовимірну чисельну модель без урахування квантових ефектів. У роботі [101] описано квазідвовимірну гідродинамічну модель, яка враховує квантові ефекти. Проте для моделювання нестационарних явищ перенесення, що відбуваються на малих відстанях в області сильного поля, потрібний кінетичний підхід, оснований на самоузгодженому розв'язку кінетичного рівняння Больцмана (1.12) і рівняння Пуассона.

Наведемо деякі результати моделювання за допомогою програми, описаної у статті [102]. Для моделювання вибрано структуру, аналогічну тій, що зображена рис. 5.2, з довжиною затвора 0,35 мкм. Шар $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ завтовшки 50 нм рівномірно легований донорами з концентрацією 10^{14} см^{-3} . Уздовж межі гетеропереходу розміщено нелегований спейсер завтовшки 5 нм, під електродами стоку і витоку є n^+ -області, за допомогою яких здійснюється контакт із двовимірним електронним газом.

Для моделювання методом Монте-Карло використовувалася тридолинна Γ -L-X модель зонної структури з параметрами матеріалів, узятими зі статті [103]. Були враховані фононні механізми розсіювання і розсіяння на іонізованих домішках у легованих областях. Межу гетеропереходу GaAs/AlGaAs брали чіткою з розривом зони провідності 0,3 еВ. Струм, що протікає через електроди, складався зі струму частинок, що поглинаються або інжектуються цим електродом, і струму зміщення. Струм кожного електрода визначався для всіх часових кроків, що дає змогу відстежувати перехідні характеристики приладу.

Приклади розподілу потенціальної енергії та густини електронного заряду в модельованій області зображені на рис. 5.5.

На зображенні потенціального рельєфу дна зони провідності (рис. 5.5, а) слід звернути увагу на зміну уздовж каналу форми потенціальної ями, створеної «стілкою» розриву дна зони провідності та просторовим зарядом електронів, що перейшли в шар GaAs з легованого AlGaAs (рис. 5.5, б). Розподіл електронів у витоковій частині каналу локалізовано біля межі гетеропереходу і, відповідно, у цій частині потенціальна яма більш крута.

З рухом електронів до витоку під дією поздовжнього гріючого електричного поля їх температура підвищується, тому, починаючи з середини затвора, вони глибше проникають у шар GaAs, і форма потенціальної ями стає більш пологою. Це видно з розподілу електронів по поперечному перерізу (рис. 5.5, в). Тут добре видно область збіднення під затвором, яка повністю позбавлена рухливих носіїв, а також збіднені області біля межі гетеропереходу з боку AlGaAs. На цьому рисунку також можна помітити початок утворення паралельного паразитного транзистора в шарі AlGaAs, проте струм, що протікає через нього, малий, оскільки в моделі немає омичного контакту до шару AlGaAs.

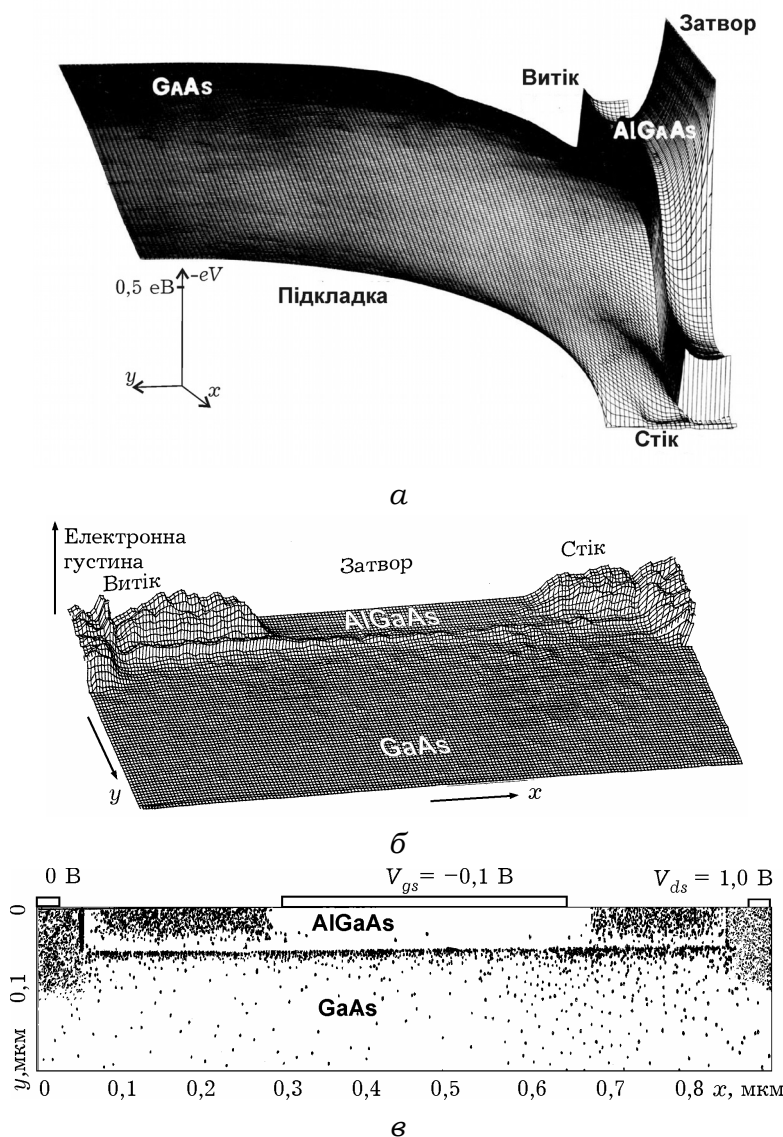


Рис. 5.5. Потенціальний рельєф дна зони провідності (*a*), розподіл густини заряду (*b*) та електронів (*v*) у поперечному перерізі ГСПТ

Цікавими для розуміння особливостей фізичних процесів, що протікають у каналі гетероструктурних транзисторів, є результати моделювання, подані на рис. 5.6. Напруженість електричного поля, що також впливає з нахилу потенціального рельєфу (рис. 5.5, а), найбільша у просторі між затвором і стоком та перевищує значення 80 кВ/см. При цьому слід звернути увагу на графік дрейфової швидкості. По-перше, її максимальне значення в півтора рази перевищує статичне значення для GaAs, що є проявом ефекту «сплеску» більш сильного, ніж у звичайному ПТШ з такою ж довжиною затвора. По-друге, зміни швидкості не слідують за зміною напруженості поля. Поблизу стокового кінця затвора швидкість починає знижуватись попри стрімке зростання напруженості поля. Це пояснюється тим, що енергія електронів досягає значень близько 0,3 еВ, достатніх для переходу електронів у L-, а потім і в X-долину. Велика ефективна маса електронів у верхніх долинах приводить до зменшення швидкості дрейфу зі зростанням їх енергії. При цьому характерно, що через більшу густину електронних станів заселеність верхніх долин може істотно перевищувати заселеність Г-долини (рис. 5.6, б).

Біля краю затвора і напруженість поля, й енергія починають спадати, але помітної релаксації не спостерігається, оскільки електричне поле, залишаючись сильним, утримує велику частину електронів у верхніх долинах. І лише в n^+ -області стоку відбувається інтенсивне повернення електронів у Г-долину, енергія ж і швидкість зменшуються до значень, близьких до рівноважних.

Результати моделювання та експерименту стокових характеристик транзистора з довжиною затвора 0,35 мкм і шириною 300 мкм подано на рис. 5.7.

Малосигнальне значення крутизни приладу за стокової напруги 2 В і струму стоку 60 мА становить 137 мСм. На характеристиках не помітно значного зменшення крутизни у разі додатних зміщень на затворі, тобто утворення паралельного

паразитного транзистора в шарі AlGaAs. Це пов'язано, як уже зазначалося, з тим, що в моделі немає омичного контакту до цього шару.

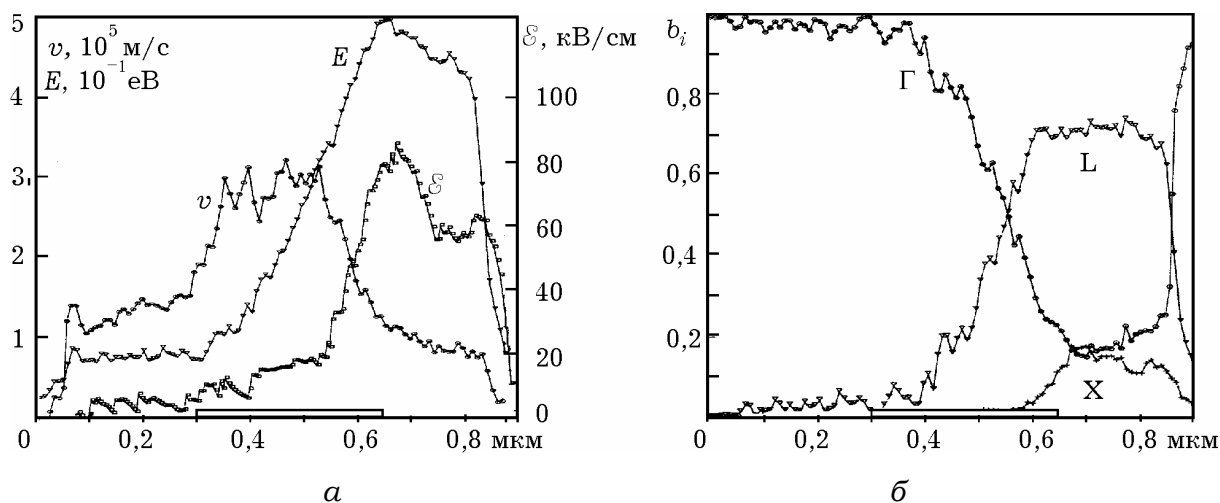


Рис. 5.6. Розподіли: напруженості прискорювального електричного поля (\mathcal{E}), дрейфової швидкості електронів (v) і їх енергії (a); розподілу електронів по долинах уздовж каналу транзистора (b)

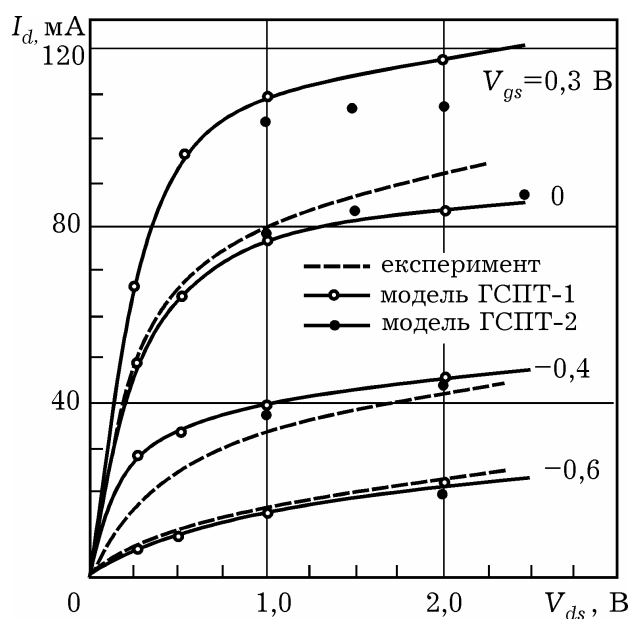


Рис 5.7. Стокові ВАХ гетероструктурних транзисторів з одним гетеропереходом (ГСПТ-1) і двоперехідного (ГСПТ-2) (штрихові лінії – результати експерименту для ГСПТ-1)

Швидкодію транзистора можна оцінити за перехідними характеристиками струмів стоку і затвора, поданих на рис. 5.8 й отриманих подаванням на затвор ступінчастої напруги $0,3 \text{ В}$ (a) і ступінчастої напруги на стоці $-1,0 \text{ В}$ (b).

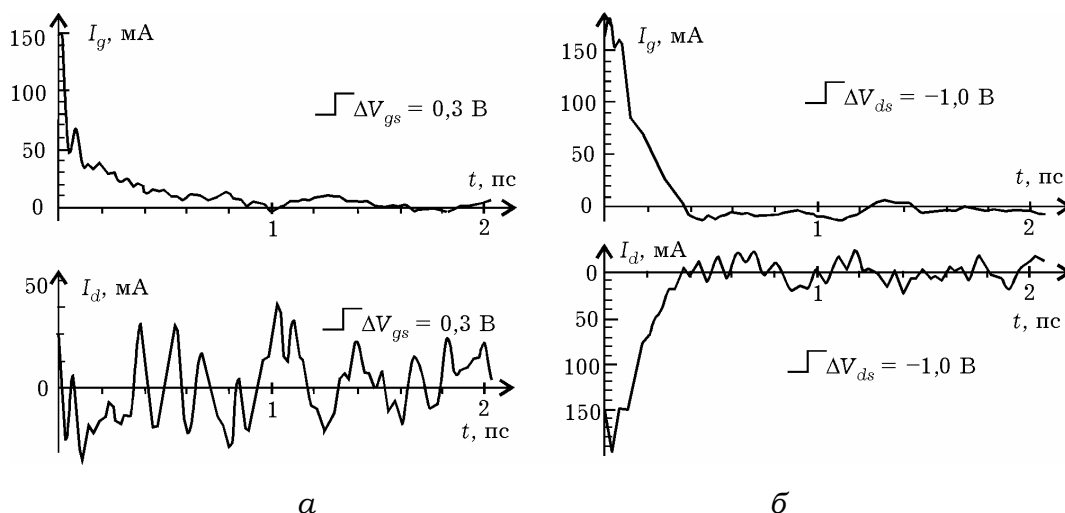


Рис. 5.8. Перехідні характеристики струмів електродів ГСПТ у разі ступінчастої зміни напруги затвора (а) і напруги стоку (б)

Сам транзистор перемикається досить швидко, перехідні процеси закінчуються за час, менший 1 пс. Проте істотний вплив на частотні властивості мають паразитні елементи. Для аналізу їх впливу за перехідними характеристиками, використовуючи перетворення Фур'є, можна розрахувати параметри матриці провідності \mathbf{Y} , а потім і параметри матриці розсіяння \mathbf{S} . На рис. 5.9 показано розраховані частотні залежності S -параметрів транзистора в робочій точці $V_{ds} = 1.5 \text{ V}$, $I_d = 30 \text{ mA}$ для внутрішньої активної частини транзистора. Частотні мітки наведено для частот 1 та 5 ГГц і далі з кроком 5 ГГц. Тут же наведено залежності S -параметрів транзистора з урахуванням паразитних параметрів, значення яких показано на схемній моделі (рис. 5.10).

Частотні залежності параметра $|S_{21}|^2$, який визначає максимальний коефіцієнт підсилення потужності, дозволяють оцінити максимальну частоту приладу. Для внутрішнього транзистора вона становить 62 ГГц, а для приладу з паразитними елементами – 48 ГГц.

Також на рис. 5.7 подано результати моделювання ВАХ із двома гетеропереходами (див. рис. 5.3, а) й аналогічними розмірами затвора [104]. Потенціальний рельєф для такого двоперехідного транзистора зображено на рис. 5.11.

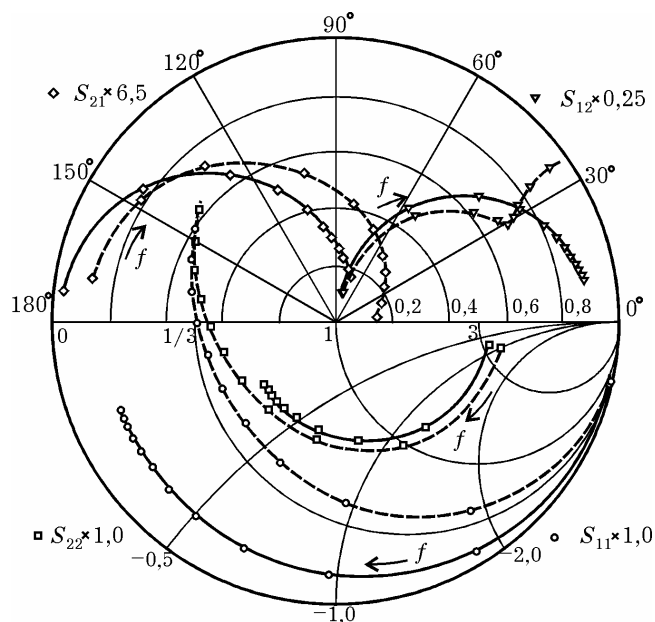


Рис. 5.9. Частотні залежності S-параметрів активної частини транзистора (суцільні лінії) з урахуванням паразитних елементів (штрихові лінії)

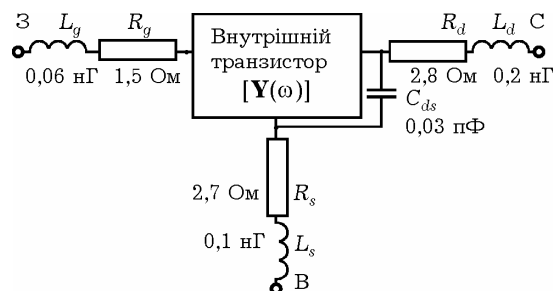


Рис. 5.10. Схемна модель ГСПТ з урахуванням паразитних елементів

Порівняння ВАХ транзисторів показує, що наявність другого гетеропереходу дещо знижує вихідну провідність, що особливо помітно для додатних потенціалів затвора. Це можна пояснити тим, що другий бар'єр локалізує електрони в області вузькозонного шару GaAs, перешкоджаючи їх переходу в підкладку з широкозонного AlGaAs і, тим самим, послаблює її «охолоджувальну» і шунтувальну дію, як це відбувається у звичайному ПТШ.

Квантові ефекти. Через розриви зони провідності й стимульованого цим накопичення електронів і вигину зони біля межі бар'єра утворюється потенціальна яма (див. рис. 5.5). У двоперехідному транзисторі така яма спостерігається між «стінками», утвореними двома переходами (рис. 5.11). У результаті енергія електронів у таких ямах квантується в напрямку, нормальному до гетеропереходу (рис. 5.12), й утворюються енергетичні підзони для поздовжнього руху.

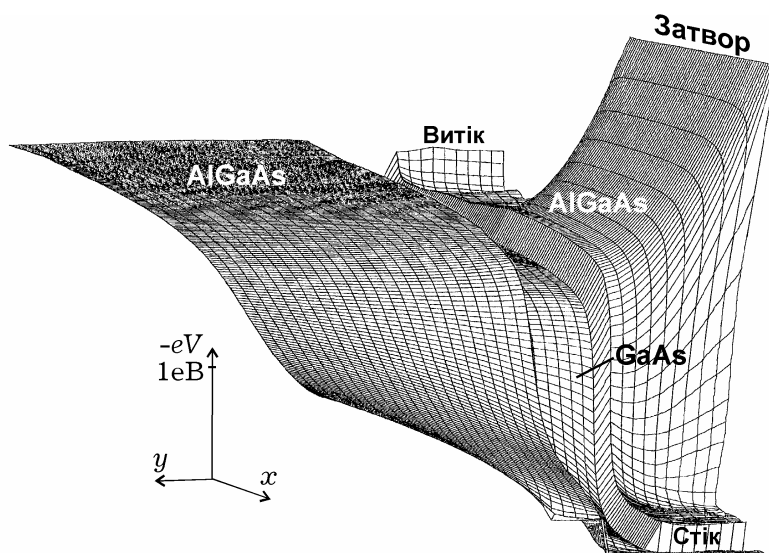


Рис. 5.11. Потенціальний рельєф для транзистора з двома гетеропереходами, канал якого утворений шаром вузькозонного GaAs між AlGaAs

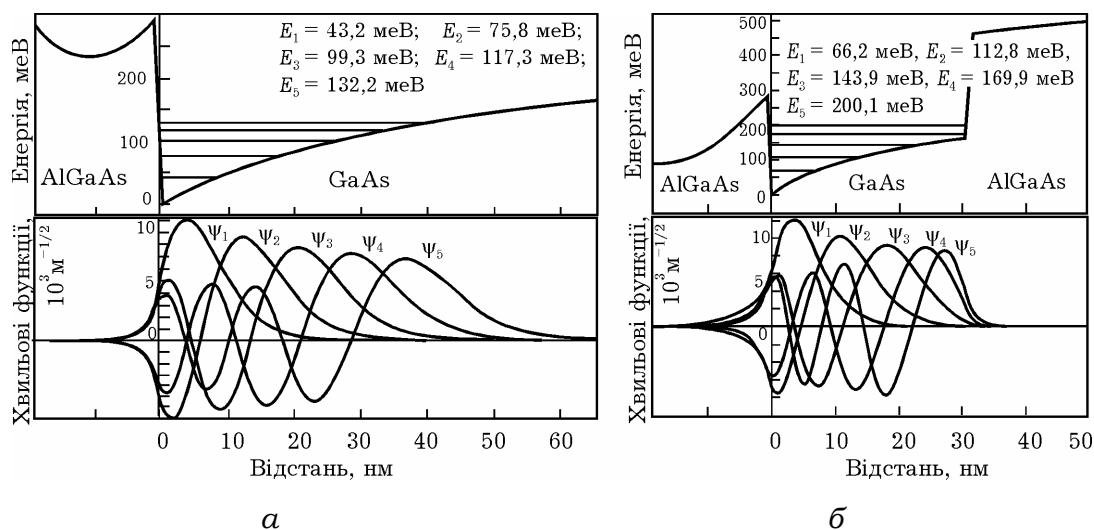


Рис. 5.12. Квантування енергетичних станів (верхній ряд) і відповідні обвідні хвильових функцій (нижній ряд) для транзистора з одним (а) і двома (б) гетеропереходами

Оскільки математичний апарат квантової теорії перенесення ще не дозволяє моделювати реальні пристрої, то найчастіше для вирішення подібного роду задач використовують наближення обвідної хвильової функції. Відповідно до нього хвильову функцію двовимірних електронів для m -го стану подають у вигляді добутку плоскої хвилі, паралельної гетеропереходу, й обвідної хвильової функції $F_m(y)$ для поперечного напрямку:

$$\psi(\vec{r}) = F_m(y) A^{-1/2} \exp i(k_x x + k_z z), \quad (5.1)$$

де A – константа нормування для площини xz . Результати розв’язання рівняння Шредінгера для обвідної хвильової функції для потенціальних ям, характерних для підзатворної частини у цих транзисторах, подано на рис. 5.12. Відстані між розрахованими рівнями істотно перевищують $k_B T$, що свідчить про необхідність аналізу квантових ефектів у ГСПТ.

У наближенні обвідної хвильової функції система рівнянь для кінетичного моделювання виглядає так:

– кінетичне рівняння:

$$\frac{\partial N(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial N(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{r}} - \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \frac{\partial N(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{k}} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c; \quad (5.2)$$

– рівняння Пуассона:

$$\nabla^2 V(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon \epsilon_0}; \quad (5.3)$$

– рівняння Шредінгера для обвідної хвильової функції:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 F_m(x, y)}{dy^2} + [U(x, y) - E_m(x)] F_m(x, y) = 0, \quad (5.4)$$

де $\rho(\vec{r})$ – об’ємна густина заряду, що включає розподіл концентрації іонізованих донорів $N_d(x, y)$, концентрацію «тривимірних» електронів $n(x, y)$ і в третьому доданку $N_i(x, y)$ – заселеність i -го рівня, k – кількість двовимірних підзон, що враховуються,

$$\rho(\vec{r}) = e \left[N_d(x, y) - n(x, y) - \sum_{i=1}^k N_i(x, y) F_i^2(x, y) \right]; \quad (5.5)$$

$U(x, y)$ – потенціальна енергія електронів, визначувана розподілом потенціалу $V(x, y)$ і розривом дна зони провідності $\Delta E_c(x, y)$, $U(x, y) = \Delta E_c(x, y) - eV(x, y)$.

У виразі (5.5) заряд «двовимірних» електронів розподіляється пропорційно просторовій густині ймовірності, тобто квадрату амплітуд обвідних хвильових функцій, і заселеності рівнів.

Під час розв’язання такої системи або на кожному кроці, або через невелику кількість часових кроків самоузгоджено розв’язується система рівнянь Шредінгера та Пуассона, а потім

кінетичне рівняння методом Монте-Карло, тобто інтегруються рівняння руху частинок у знайденому електричному полі. «Двовимірні» електрони можуть рухатися лише в площині, паралельній гетеропереходу. Окрім системи рівнянь (5.2)–(5.5) слід враховувати граничні умови під час проходження частиною гетеропереходу. Класичні (без урахування тунелювання) граничні умови виходять із закону збереження імпульсу, паралельного гетеропереходу, та енергії:

$$k'_{\parallel} = k''_{\parallel}; \quad (5.6)$$

$$\frac{(\hbar k'_{\parallel})^2}{2m^{*'}} + \frac{(\hbar k'_{\perp})^2}{2m^{*'}} = \frac{(\hbar k''_{\parallel})^2}{2m^{*''}} + \frac{(\hbar k''_{\perp})^2}{2m^{*''}} + \Delta E_c, \quad (5.7)$$

де $m^{*'}$ – ефективна маса електрона; k'_{\parallel} і k'_{\perp} – нормальна до гетеропереходу і паралельна йому складові хвильового вектора в широкозонному матеріалі; $m^{*''}$, k''_{\parallel} , k''_{\perp} – відповідні величини у вузькозонному матеріалі.

У процесі реалізації повністю самоузгодженої моделі польового гетеротранзистора виникають такі основні труднощі:

а) форма потенціальної ями $V(y)|_{x=\text{const}}$ змінюється уздовж каналу, і отже, хвильові функції залежатимуть від координати x , що ускладнює розв'язання системи рівнянь Пуассона і Шредингера;

б) у двовимірних ямах необхідно використовувати співвідношення для швидкостей двовимірного розсіювання, при цьому є ймовірність як внутріпідзонного, так і міжпідзонного розсіювання, що значно збільшує розмір матриці швидкостей розсіювання. Хоча для більшості механізмів розсіювання ймовірність міжпідзонних переходів мала, для полярного оптичного розсіювання, яке переважає в середніх електричних полях, нею нехтувати не можна. Крім того, якщо враховувати двовимірне розсіювання, то матричні елементи залежатимуть від форми обвідної хвильової функції і визначаються чисельним інтегруванням. Це зумовлює додаткові обчислювальні витрати, оскільки форма обвідної змінюється у процесі розв'язання задачі.

Проте за кімнатних температур і в сильних електричних полях, що виникають у реальних структурах в області «затвор–стік», за напруги на стоці більше 1 В двовимірні квантові ефекти проявляються слабо [104]. До того ж, для великої від’ємної напруги на затворі квантова яма стає настільки широкою, що відстань між рівнями квантування може стати меншою за величину $k_B T$. Тим більше, що розігрівання електронів у сильному полі підсилює цю нерівність і послаблює прояв квантових ефектів.

5.3. ДВОВИМІРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРНИХ ПОЛЬОВИХ ТРАНЗИСТОРІВ

Відомі різні підходи до моделювання фізичних процесів у субмікронних гетеротранзисторах [105–108], які є частиною ієрархічного ряду моделей – спрощені аналітичні моделі [105] (що враховують, наприклад, балістичний дрейф носіїв заряду за довжини затвора 0,15 мкм і температури кристалічної ґратки 77 К), одновимірні для схемотехнічних розрахунків [106] і моделі [107; 108], що містять релаксаційні рівняння збереження енергії та імпульсу в квазідвовимірному наближенні. В останньому випадку всі рівняння інтегруються уздовж однієї координати у напрямку прискорювального поля, а розмір області збіднення в наближенні чіткої межі на кожному кроці розраховується залежно від поточного значення потенціалу в каналі.

У спрощених моделях гетероструктур використовують апроксимації залежностей рухливості електронів від напруженості електричного поля. Ці рівняння є локальною моделлю струмоперенесення, в якій швидкість (рухливість) носіїв «локально» слідує за змінами напруженості електричного поля. У такій системі неможливо описувати нелокальні ефекти «сплеску» дрейфової швидкості електронів і дірок, ефекти накопичення носіїв унаслідок зміни їх енергії та ефективної маси під час переходу

у верхні долини. У гетероструктурах, виготовлених на основі багатодолинних напівпровідників, незважаючи на переважаючий дрейф електронів у двовимірній потенціальній ямі необхідно враховувати істотний вплив у сильних електричних полях міждолинного розсіяння і різні умови розігрівання й релаксації носіїв у долинах [8; 109].

Структуру модельованого гетеротранзистора подано на рис. 5.13, вона характеризується такими фізико-топологічними параметрами: довжиною затвора 0,2 мкм, шаром широкозонного легованого $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0,3$) під затвором ефективною товщиною 0,1 мкм, шаром нелегованого $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ завтовшки 50 Å (спейсер), шаром нелегованого GaAs на напівізолювальній підкладці завтовшки в декілька десятків мікрометрів, у поверхневому шарі якого в результаті розриву зон утворюється потенціальна яма. Оскільки всі електронні процеси пов'язані з поверхневим шаром і двовимірним електронним газом (ДЕГ) у потенціальній ямі, то для моделювання можна обмежитися ефективною товщиною транзистора 1...2 мкм.

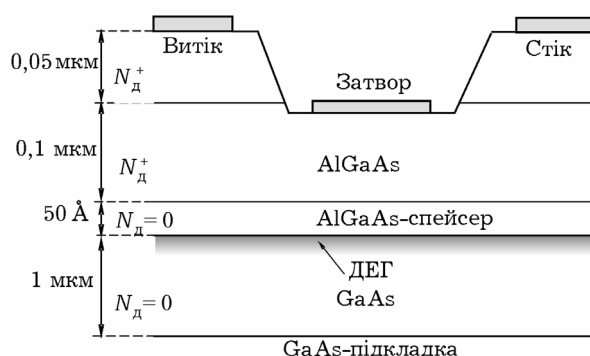


Рис. 5.13. Топологічна структура гетеротранзистора з ДЕГ

Алгоритм моделювання й особливості його реалізації наведено в додатку до розд. 5. На рис. 5.14–5.17 подано результати двовимірного моделювання основних фізичних характеристик в каналі субмікронного гетеротранзистора. Затвор розміщено симетрично до координати $x = 0$.

Наведені характеристики розраховані за електричного зміщення на електродах витоку, затвора і стоку, відповідно 0; –0,5; 3,0 В. Розрив зон на межі гетеропереходу задають під час розв'язання рівняння Пуассона як вбудований потенціал заввишки близько 0,4 В за припущення відсутності квантових ефектів для електронів у потенціальній ямі.

Як показують результати моделювання, розігрівання електронного газу і зростання температури електронів більшою мірою пов'язане з електронами, що дрейфують у потенціальній ямі на межі гетеропереходу. Ефект «сплеску» дрейфової швидкості помітний як для електронів гетеропереходу, так і для електронів, що дрейфують у високолегованому шарі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Проте оскільки область за затвором збіднена носіями заряду, лише незначна їх кількість має високі значення швидкості.

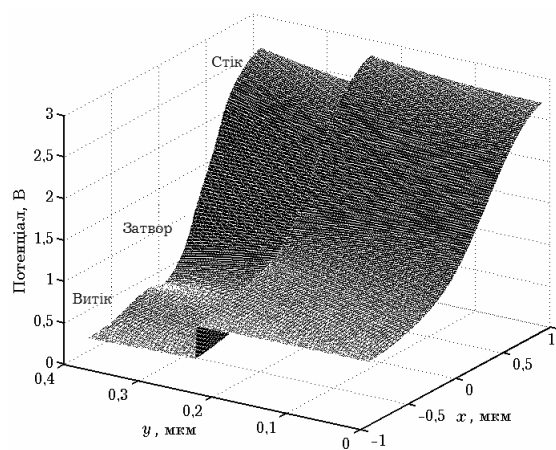


Рис. 5.14. Розподіл потенціалу в структурі гетеротранзистора

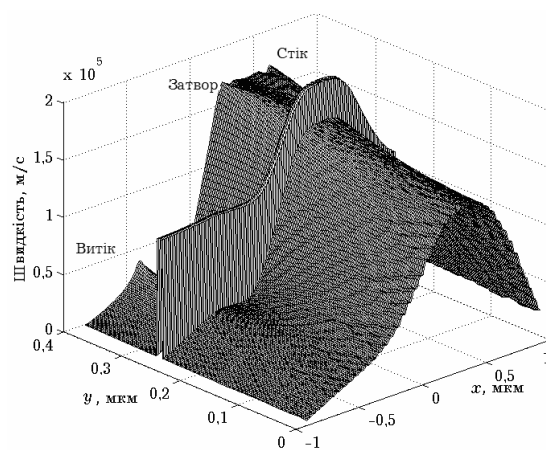


Рис. 5.15. Розподіл дрейфової швидкості

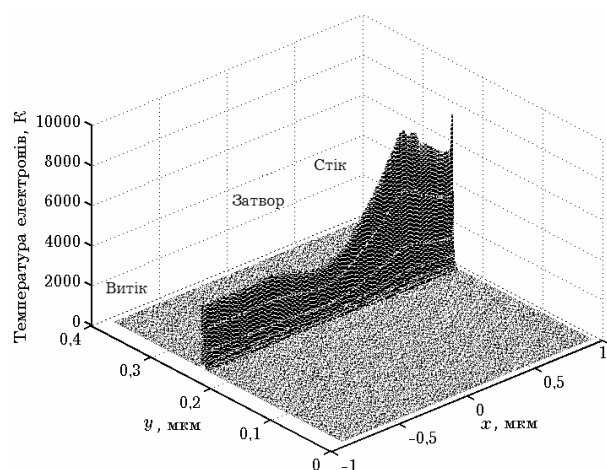


Рис. 5.16. Розподіл температури електронного газу

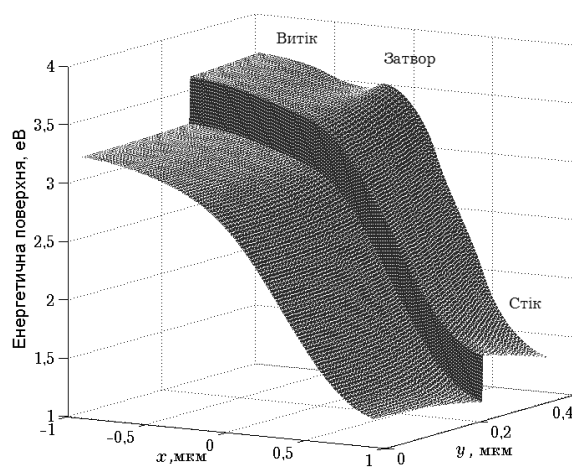


Рис. 5.17. Потенціальна енергетична поверхня

Результати порівняння модельованих характеристик субмікронних гетеротранзисторів з довжиною затвора 0,25 і 0,5 мкм, розрахованих за двовимірною моделлю з використанням

релаксаційних рівнянь і кінетичної моделі Монте-Карло [110], показано на рис. 5.18.

Найістотніше результати моделювання відрізняються на пологій ділянці характеристик. Відмінність у нахилі характеристики, а отже, у вихідній малосигнальній провідності, може бути більшою мірою пов'язана з похибкою визначення часу релаксації за двовимірною моделлю, тоді як у кінетичній моделі процеси розсіяння моделюються імовірнісними методами на більш високому фізичному рівні.

Отже, моделі процесів дрейфу в субмікронних транзисторах із селективним легуванням на основі системи рівнянь релаксацій у двовимірному наближенні дозволяють зробити висновки про те, що ефектами, які визначають роботу субмікронних гетероструктур, є дрейф і розігрівання електронів за умов переважного міждолинного й оптичного розсіяння носіїв

заряду. Важливою особливістю є те, що області сильного поля і розігрівання електронного газу пов'язані з великими градієнтами характеристик у підзатворній області й локалізуються в обмеженій області за затвором.

Такі моделі придатні для розрахунку субмікронних гетероструктур на основі широкого спектра сполук напівпровідників $A^{III}B^V$ з міждолинним перенесенням електронів, а також для визначення параметрів активних і пасивних областей транзистора, апроксимацій характеристик для спрощених моделей транзисторів і їх схемотехнічного аналізу.

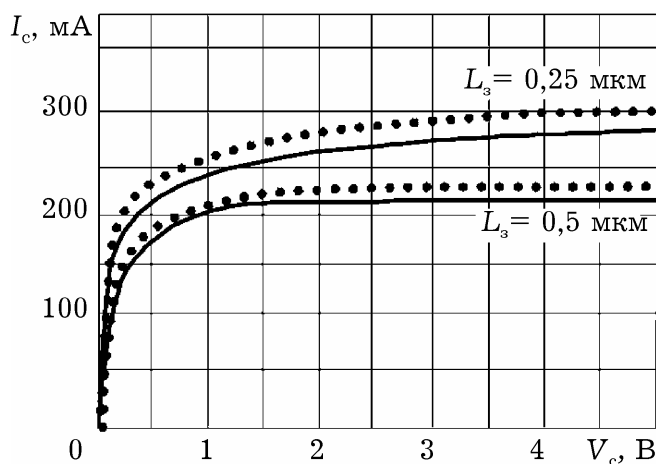


Рис. 5.18. Вольт-амперні характеристики транзисторів з гетероселективним легуванням з довжиною затвора 0,25 і 0,5 мкм, розраховані за двовимірною (суцільна лінія) і кінетичною моделлю Монте-Карло

5.4. ГЕТЕРОТРАНЗИСТОРИ З ДВОМА ПОТЕНЦІАЛЬНИМИ ЯМАМИ

Розглянемо моделі й результати моделювання субмікронних гетеротранзисторів з двома потенціальними ямами (з двома каналами з двовимірним електронним газом). У таких структурах вищих значень дрейфової швидкості електронів досягають за рахунок дрейфу носіїв у двох потенціальних ямах за умов перерозподілу їх швидкостей та енергій.

Підвищення швидкодії транзисторів може бути також пов'язане зі створенням структур з субмікронними поздовжніми і нанометровими поперечними розмірами, зокрема багатосферними наноструктурами низької розмірності [111–113].

Характерні розміри затвора таких гетероструктурних транзисторів становлять 0,1...0,2 мкм за розмірів високолегованих шарів в активній області транзистора менших за 0,1 мкм. Моделювання гетеротранзистора з двома потенціальними ямами цікаве у зв'язку з перерозподілом носіїв між двома «каналами» і, попри збільшення ефективної товщини транзистора (що може викликати зменшення крутизни транзистора), приводить до зменшення розігрівання електронів, що пов'язане зі зменшенням імовірності їх міждолинного розсіяння і зумовлює підвищення середньої дрейфової швидкості електронного газу.

5.4.1. Чисельне моделювання

Як і в традиційних субмікронних гетеротранзисторах, у структурах з декількома гетеропереходами переважають ефекти сильного поля і субмікронні ефекти: квазібалістичне перенесення, розігрівання за умов переважання міждолинного та оптичного розсіяння носіїв заряду, ефект «сплеску» дрейфової швидкості електронів тощо. Область сильного поля і нестационарні процеси пов'язані з двовимірною областю під затвором і двовимірними розподілами характеристик електронного

газу – електронної температури (енергії), імпульсу (швидкості), ефективної маси тощо. Особливістю процесів у таких структурах є перерозподіл носіїв між потенціальними ямами, коли відстань між ними не перевищує довжини вільного пробігу електронів.

Моделювання субмікронних багатошарових структур зі складною топологією пов'язане з використанням чисельних методів із заданим кроком дискретизації та адаптивною процедурою вибору кроку, а також з неоднорідними граничними умовами між шарами структури.

Тестову структуру гетеротранзистора, що моделюється, подано на рис. 5.19. Вона характеризується такими фізико-топологічними параметрами: довжиною затвора 0,2 мкм, шаром широкозонного легованого $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0,3$) під затвором з ефективною товщиною 0,1 мкм, шаром нелегованого $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ завтовшки 50 Å (спейсер), шаром нелегованого GaAs на напівізолювальній підкладці завтовшки декілька десятків мікрометрів, у поверхневому шарі якого в результаті розриву зон утворюється потенціальна яма. Параметри другого каналу ГСПТ аналогічні й показані на рис. 5.19 (вісь x направлена вздовж каналу транзистора, вісь y – перпендикулярно каналу від поверхні затвора).

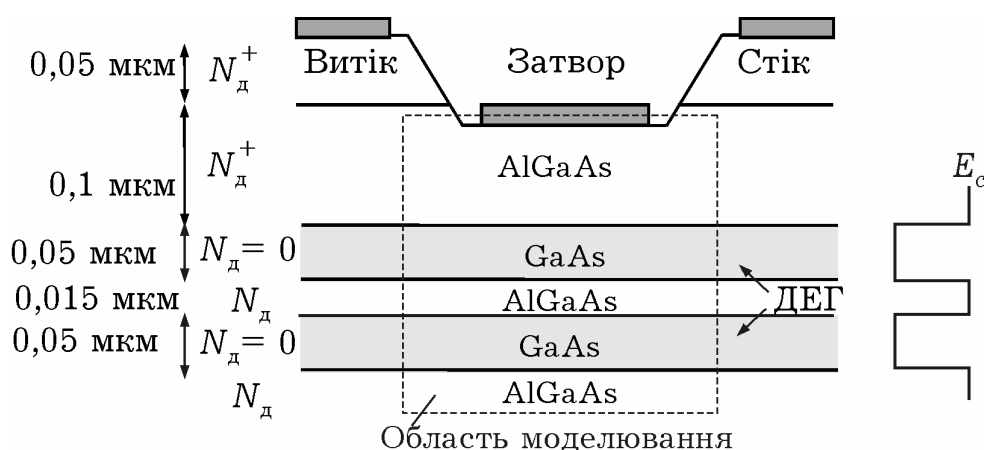


Рис. 5.19. Структура гетеротранзистора з двома гетероканалами

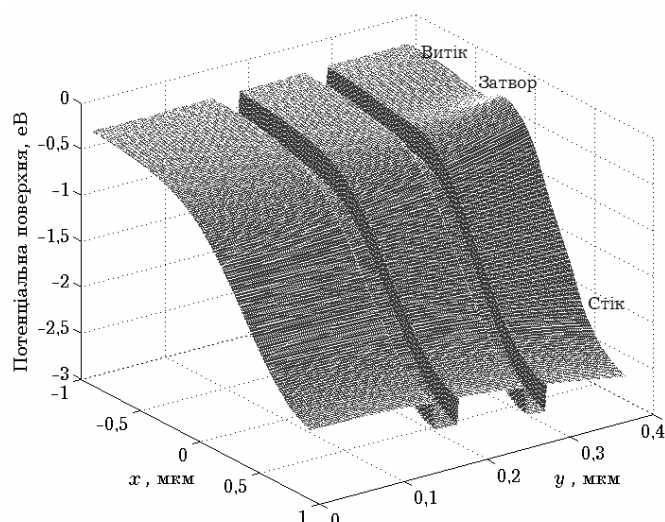


Рис. 5.20. Потенціальний рельєф у структурі гетеротранзистора з двома гетероканалами

Оскільки всі електронні процеси пов'язані з поверхневим шаром і ДЕГ у потенціальних ямах, то область моделювання обмежується ефективною товщиною транзистора до 1 мкм.

Двовимірні розподіли потенціальної енергії, електронної температури і дрейфової швидкості в каналі ГСПТ зображено на рис. 5.20–5.22.

Вихідний струм транзистора розраховують як нормальну складову струму до контакту стоку за відомих двовимірних розподілів концентрації електронів, напруженості електричного поля і швидкості за результатами розв'язання вихідної системи рівнянь у разі досягнення заданої точності у вузлах сітки.

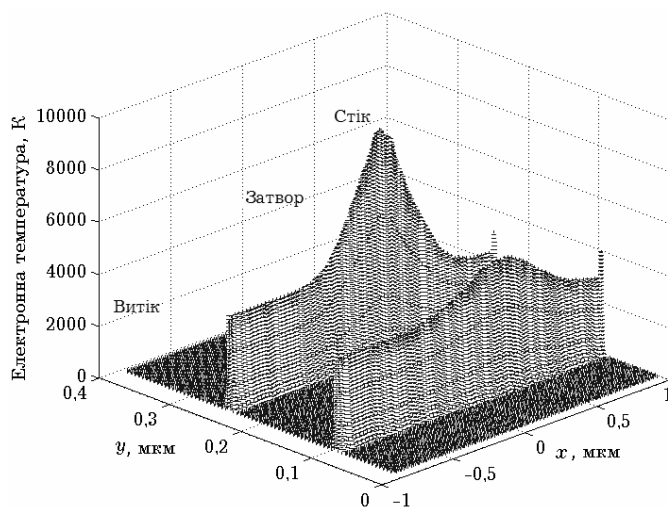


Рис. 5.21. Розподіл електронної температури

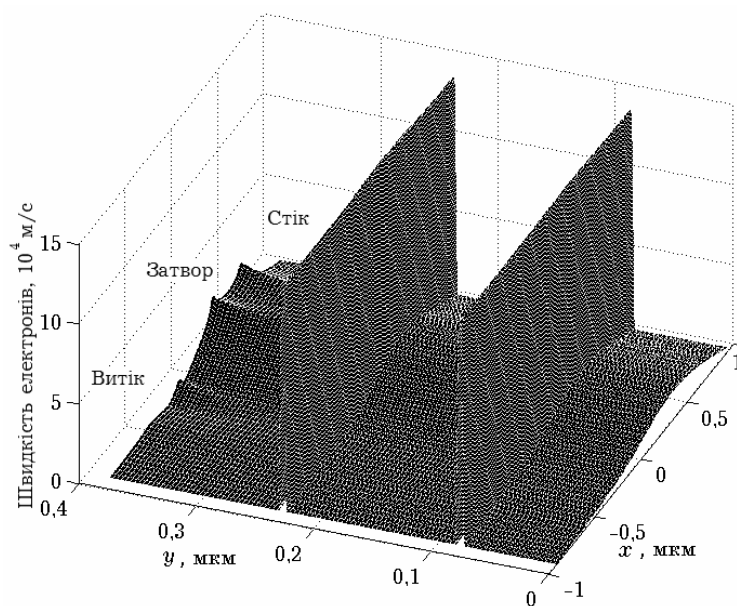


Рис. 5.22. Розподіл дрейфової швидкості

Наведені на рис. 5.20–5.22 розподіли розраховані за електричного зміщення на електродах витіку, затвора і стоку 0; $-0,5$; $3,0$ В відповідно. Разрив зон на межі гетеропереходів задавався при розв’язання рівняння Пуассона як вбудований потенціал заввишки близько $0,4$ В за відсутності квантових ефектів для електронів в обох потенціальних ямах.

Як показують результати моделювання, розігрівання електронного газу і зростання температури електронів більшою мірою пов’язане з електронами, що дрейфують у потенціальній ямі на межі гетеропереходів. Пікові значення температури електронів (рис. 5.21) у першому гетеропереході (що примикає до затвора) дещо вищі, ніж у другому, що свідчить про перерозподіл електронів за енергіями. Ефект «сплеску» дрейфової швидкості помітний для електронів обох гетеропереходів. Результати моделювання електронної температури (рис. 5.21) і дрейфової швидкості (рис. 5.22) [114–116] свідчать про менший ступінь розігрівання носіїв електричним полем і вищі значення дрейфової швидкості, ніж в аналогічному гетеротранзисторі з однією потенціальною ямою, приблизно на $30\ldots 40\%$. Це може бути пов’язане із запізнюванням процесів розігрівання носіїв електричним полем, оскільки дрейф носіїв пов’язаний переважно

з електронами в потенціальних ямах, а також «охолоджуванням» носіїв у разі їх витіснення полем затвора з однієї потенціальної ями до іншої й подолання другого потенціального бар'єра зі зменшенням енергії. При цьому відстань між гетеропереходами, як показують результати чисельних експериментів, має бути меншою від довжини вільного пробігу електронів. Максимальних значень дрейфової швидкості для наведеної структури досягають за від'ємних зміщень на затворі 0,5...0,6 В.

Показано, що середні значення дрейфової швидкості у цій структурі вищі, ніж у ГСПТ з однією потенціальною ямою, при цьому транзистори з двома гетеропереходами мають вищі значення струму і потужності.

Наведені моделі придатні (за відповідної апроксимації часу релаксації) для розрахунку субмікронних гетероструктур на основі широкого спектра сполук напівпровідників $A^{III}B^V$ з міждолинним перенесенням електронів, зокрема перспективних сполук на основі InP, GaN тощо.

5.4.2. Аналітична модель статичних характеристик

Для отримання аналітичних співвідношень розглянемо структуру транзистора з різкими межами гетеропереходів зі скінченною товщиною Δd (рис. 5.23).

Для аналізу статичних характеристик потрібно описати залежність концентрації електронів у двовимірному каналі від напруги на затворі та на стоці транзистора [117]. З урахуванням наявності двох шарів із двовимірним електронним газом можна записати:

$$n_s = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{e(2d_i + d_d + 2\Delta d)} [V_g - V_{t_0} - V(x)], \quad (5.8)$$

де $(2d_i + d_d)$ – спільна товщина шару AlGaIn, як показано на рис. 5.23, де V_{t_0} – порогова напруга; $2\Delta d \approx 100 \text{ \AA}$. Координата x відлічується від витоку до стоку уздовж каналу транзистора.

Для розрахунку залежності дрейфової швидкості електронів від напруженості скористаємося апроксимацією роботи [118].

Ця залежність враховує багатодолину структуру енергетичних зон нітриду галію, тому така залежність має максимум і, відповідно, ділянку з від'ємним опором. Під час підбирання коефіцієнтів було використано експериментальну залежність дрейфової швидкості від електричного поля [119], її апроксимація може бути подана співвідношенням

$$v(x) = \frac{v_0 \mathcal{E}(x)/\mathcal{E}_0 + v_s [\mathcal{E}(x)/\mathcal{E}_0]^2}{1 + [\mathcal{E}(x)/\mathcal{E}_0]^2}, \quad (5.9)$$

де $v_0 = \mu_0 \mathcal{E}_0$; \mathcal{E}_0 – порогове значення електричного поля (для GaAs рівне 4 кВ/см, а для GaN – 100 кВ/см; μ_0 – низькопольове значення рухливості; v_s – швидкість насичення.

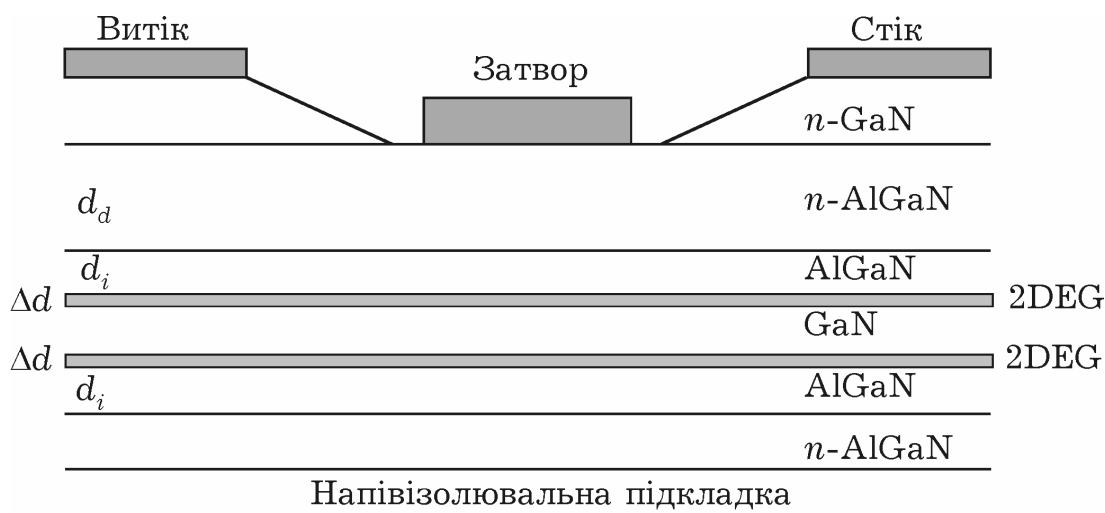


Рис. 5.23. Структура AlGaIn/GaN транзистора з високою рухливістю електронів із двома гетероканалами

Для аналізу температурних залежностей і врахування рівнів легування можна використати більш універсальну формулу. Під час моделювання двоканального гетеротранзистора на основі нітриду галію слід враховувати особливості його поле-швидкісної характеристики. Слід зазначити, що ширина забороненої зони в нітриді галію істотно більша (3,39 еВ) ніж в арсеніді галію (1,42 еВ). Струм стоку описують виразом

$$I_{ds} = en_s(x)v(x)W, \quad (5.10)$$

де W – ширина транзистора.

Узгоджено вирішуючи рівняння (5.8–5.10), а також рівняння для потенціалу, можна отримати аналітичний вираз для вольт-амперної характеристики [117]:

$$I_{ds} = \beta \frac{(V_g - V_0)V_{ds} - V_{ds}^2/2}{1 + \alpha V_{ds}}, \quad (5.11)$$

де $\beta = \epsilon\epsilon_0\mu W/(2d_i + d_d + 2\Delta d)L_g$; μ – рухливість електронів; L_g – довжина затвора; $\alpha = (v(x)/v_0)/\epsilon_0 L_g + \beta R_s$; R_s – опір витоку.

У цій моделі для розрахунку поверхневої концентрації та дрейфової швидкості електронів можуть використовуватися усереднені значення двовимірного розподілу концентрації та електричного поля, отримані двовимірним моделюванням за заданих значень потенціалів затвора і стоку:

$$n_{cp} = \frac{\iint n(x, y) dx dy}{a_x a_y}; \quad \mathcal{E}_{cp} = \frac{\iint \mathcal{E}(x, y) dx dy}{a_x a_y},$$

де a_x і a_y розміри області двовимірного моделювання.

Можна також використовувати наведену аналітичну модель гетеротразистора за відомих із двовимірного моделювання значень дрейфової швидкості насичення й відстані в каналі, за якої відбувається насичення швидкості.

Для отримання струму і напруги насичення обчислимо похідну $g_d = \partial I_d / \partial V_d$ і прирівняємо $g_d = 0$, тоді отримаємо:

$$V_{dSat} = \frac{\sqrt{1 + 2\alpha(V_g - V_{t_0})} - 1}{\alpha}.$$

Коли струм у каналі досягає насичення, рівняння Пуассона [114] можна записати у такому вигляді:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \frac{J}{v_s},$$

де густина струму $J = I_{dSat}/W\Delta d$; v_s – дрейфова швидкість носіїв у точці насичення.

Використовуючи граничні умови

$$V(0) = V_{dSat}; \quad \frac{\partial V(0)}{\partial x} = \mathcal{E}_{dSat} \approx \frac{V_{dSat}}{L_g},$$

можна отримати аналітичний вираз для довжини перекритого каналу в такому вигляді [118]:

$$L_s = \gamma \left[\sqrt{1 + 2 \frac{(V_{ds} - V_{dSat})}{\gamma \mathcal{E}_{dSat}}} - 1 \right].$$

За напруги затвора, що перевищує напругу насичення, струм у каналі можна розрахувати за формулою (5.7), але замість V_{ds} слід підставляти V_{dSat} , а замість L_g взяти $(L_g - L_s)$.

Відомі також інші підходи до отримання аналітичних співвідношень для розрахунку статичних характеристик гетеротранзистора, зокрема на з'єднаннях AlGaAs [119; 120].

5.4.3. Схемні моделі й шумові параметри

Для розрахунку малосигнальних значень крутизни, вихідної провідності, вхідної і прохідної ємностей можна використовувати підхід, застосований для розрахунку аналогічних параметрів для субмікронного ПТШ, за відомих статичних вихідних і прохідних характеристик, з урахуванням приростів заряду під затвором як реакції на зміну вхідної й вихідної напруги транзистора.

Для визначення паразитних НВЧ-елементів субмікронного польового транзистора зазвичай використовують малосигнальні S -параметри або параметри, виміряні за напруги «стік-витік» $V_{ds} = 0$, оскільки за таких умов схемну модель можна значно спростити. Крім того, одним із чинників, що дозволяють здійснити таке спрощення, є відносна симетрія активного каналу, визначувана симетрією збідненої області під затвором. Геометрична асиметрія, що зазвичай існує між витоковим і стоковим контактами, пов'язана з доменом сильного поля. У разі субмікронних довжин затвора (0,1...0,2 мкм), коли довжина затвора порівнянна з товщиною каналу, розподіли фізичних величин під затвором електричного поля, концентрації носіїв, їх енергії тощо мають двовимірний характер, тому асиметрія області просторового заряду стає менш яскраво

вираженою. Це стосується також субмікронних гетероструктур. Ідентифікація схемних малосигнальних і паразитних параметрів найчастіше ґрунтується на обчислювальних процедурах оптимізації імпедансу за експериментальними S -параметрами у робочому діапазоні частот. Елементи активної області визначаються за допомогою малосигнальної схемної моделі транзистора.

Розрахунок мінімального коефіцієнта шуму в субмікронних гетеротранзисторах з двома каналами, також як і для субмікронних ПТШ, ґрунтується на використанні схемної моделі з різного роду локальними джерелами шуму. У цьому разі методика розрахунку мінімального коефіцієнта шуму в субмікронних ПТШ може бути адаптована для розрахунку гетероструктур після отримання усереднених значень енергії, швидкості, напруженості електричного поля та інших характеристик активної області транзистора.

У гетеротранзисторах із двома гетеропереходами наявні фактично всі складові шуму, властиві короткоканальним транзисторам із затвором Шотткі, головна відмінність полягає в урахуванні шуму струмозподілу.

Для двоканального гетеротранзистора шум струмозподілу, окрім складової струму через підкладку, пов'язаний також з випадковим характером перерозподілу електронів між гетеропереходами. Це має спричинити наявність додаткової складової шуму. Мінімізація цієї складової шуму також пов'язана з оптимальним вибором електричного зміщення на затворі.

Для гетеротранзистора з двома гетеропереходами, за умови відсутності струму через підкладку, шум струмозподілу між двома каналами (потенціальними ямами з двовимірним електронним газом) запишемо як

$$\overline{|i_{\text{ТНЕМТ}}|^2} = 2e \left(\frac{I_{\text{к1}} I_{\text{к2}}}{I_{\text{с}}} \right) \Delta f,$$

де $I_{\text{к1}}$, $I_{\text{к2}}$, $I_{\text{с}}$ – складові струму першого і другого каналів і повний струм стоку відповідно. Як видно з останнього співвідно-

шення, максимальний шум струмозподілу спостерігається за $I_{K1} \approx I_{K2}$.

Враховуючи той факт, що повного перекриття гетеропереходу не відбувається, шум струмозподілу в гетеротранзисторах із двома каналами, на відміну від традиційного субмікронного ПТШ, дає більший внесок до сумарного шуму транзистора.

З аналізу складових шуму можна зробити такі висновки. Малошумний режим у гетеротранзисторах з двома каналами пов'язаний з напругою на затворі, істотно меншою від значень потенціалу відсікання струму стоку (у традиційних субмікронних ПТШ цього режиму досягають за малих струмів стоку для потенціалів, близьких до відсікання струму), коли носії першого каналу за рахунок розігрівання електричним полем долають потенціальний бар'єр і, втративши частину енергії, потрапляють до другого гетеропереходу. Це приводить до зменшення ймовірності міждолинного розсіяння і зменшення шуму, пов'язаного з розігріванням носіїв, яке переважає в субмікронних транзисторах. У гетеротранзисторах з двома гетеропереходами процеси, пов'язані з міждолинними переходами, як вже було показано, послаблюються, що зменшує середню температуру електронного газу і, відповідно, розігрівний шум каналу. Отже, в гетеротранзисторах із двома каналами малошумний режим досягається за великих значень струму стоку, що дозволяє забезпечити вищі рівні потужності транзистора.

Мінімальний коефіцієнт шуму забезпечується як вибором електричного режиму, так і умовами узгодження. Цікаве також дослідження гетеротранзистора з двома потенціальними ямами і вбудованими одновимірними системами – квантовими точками (КТ) (рис. 5.24).

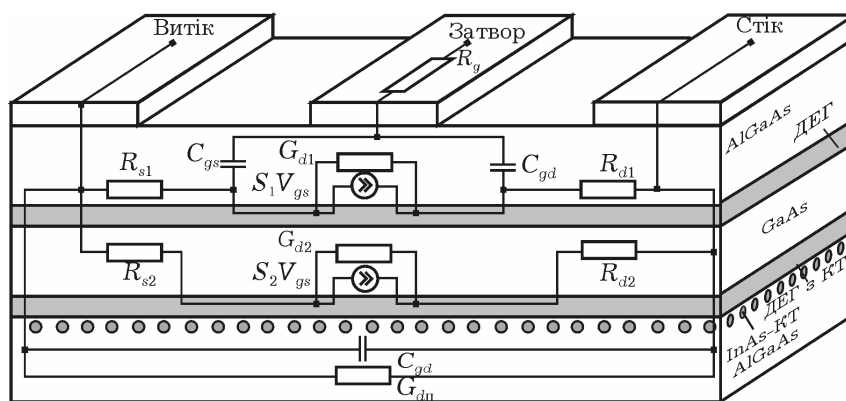


Рис. 5.24. Топологія і схемна модель двоканального гетеротранзистора з КТ

Зображені моделі субмікронного гетеротранзистора з двома гетеропереходами, що враховують додаткові джерела шуму за рахунок струморозподілу між потенціальними ямами, придатні для розрахунку сигнальних і шумових характеристик.

5.5. ГЕТЕРОСТРУКТУРНІ ТРАНЗИСТОРИ ІЗ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ

Перспективними щодо швидкодії є гетероструктури з КТ на основі нітриду галію. Як показують результати фізико-топологічного моделювання субмікронного польового гетеротранзистора з КТ, у них швидкість носіїв вища, ніж у звичайному ПТІІІ.

Спосіб отримання КТ ґрунтується на здатності самоорганізації наноструктур. Найважливішими чинниками, що визначають напрям і кінцевий результат самоорганізації, є розузгодження параметрів ґраток (що створює пружні напруги в системі й підвищує її внутрішню енергію), товщина шару, меж поділу тощо. Але сучасні можливості технології ще не дозволяють зробити вирощування КТ повністю контрольованим і відтворним, тому неоднорідність острівців КТ і їх параметрів зумовлює необхідність урахування випадкового характеру розміщення, розмірів, енергетичних та інших характеристик КТ.

Квантові точки арсеніду індію формуються поблизу гетеропереходу в шарі нітриду галію [121]. Вони захоплюють частину

електронів провідності каналу, які зі збільшенням напруженості електричного поля в каналі інжектуються з КТ і збільшують струм у каналі транзистора. За рахунок малої початкової енергії ймовірність розсіяння таких електронів на оптичних фононах фактично дорівнює нулю [122]. У результаті середня енергія електронів у каналі знижується, і швидкість насичення стає вищою. Причому досягається це не граничними можливостями субмікрометрової літографії, а за рахунок переважання двох фізичних чинників: безінерційної ударної іонізації КТ у сильному електричному полі й істотного підвищення дрейфової швидкості електронів у каналі транзистора.

У роботі [123] показано, що максимальні значення дрейфової швидкості в транзисторі з КТ у два рази вищі, ніж у традиційних ГСПТ, при цьому слід враховувати тривимірний характер фізичних процесів у гетеротранзисторах з КТ, зумовлених як особливостями топології (ширина транзистора порівнянна з розмірами уздовж координати x , пов'язаної з прискорювальним електричним полем), так і випадковим характером параметрів КТ. Структуру модельованого транзистора показано на рис. 5.25, а, а зафіксоване на атомно-силовому мікроскопі зображення шару з КТ, що самоорганізуються, зображено на рис. 5.25, б [124].

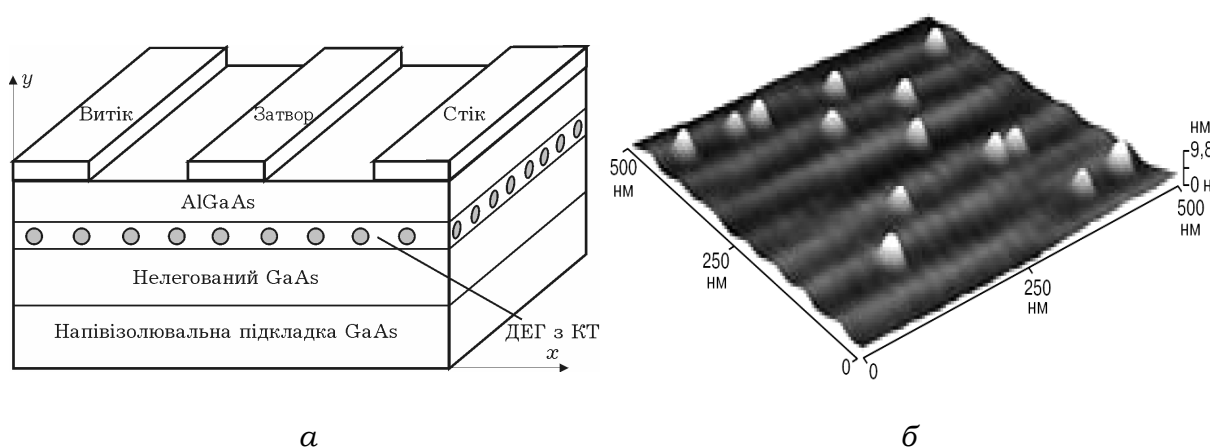


Рис. 5.25. Схематичне зображення гетероструктурного польового транзистора з КТ, де ДЕГ – двовимірний електронний газ (а) та структура з квантовими точками, що самоорганізуються (б)

У процесі моделювання субмікронних приладів, що мають багатошарову структуру і містять штучні неоднорідності й дефекти, виникає ряд труднощів через наявність великих градієнтів електричного поля, тому значно підвищуються обчислювальні витрати за рахунок додаткового дроблення кроку в разі використання ітераційних методів, згущування сітки тощо. Ще більш актуальною стає задача адаптації чисельних методів до розв'язку системи двовимірних диференціальних рівнянь у частинних похідних для моделювання фізичних ефектів у каналі ГСПТ із КТ.

У структурах із вбудованими КТ, в яких рух частинок квантований за всіма трьома координатами, спектром густини станів є набір δ -функцій [125].

Субмікронний гетеротранзистор із квантовими точками моделюється на основі системи релаксаційних рівнянь з урахуванням переважаючих механізмів розсіяння. Для отримання розподілу потенціалу з урахуванням квантової ями гетеропереходу і квантових точок у потенціальний рельєф відповідно вбудовуються «сходинок» потенціалу 0,3 і 0,7 В в окремі вузли сітки без урахування в них квантових ефектів.

Було змодельовано структуру GaN гетеротранзистора з КТ з такими параметрами: довжина затвора 0,4 мкм, напруга на затворі 0,2 В, напруга на стоці 4 В. Канал і КТ отримані вбудовуванням у потенціальний рельєф сходинок потенціалу: 0,3 В для квантової ями гетеропереходу і 0,7 В для КТ з урахуванням того, що густина квантових точок у реальній структурі становить $\sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$ [126].

З розподілу потенціалу в модельованій структурі (рис. 5.26) видно, що знаходження носіїв у квантовій точці енергетично вигідне. Це пояснює факт перерозподілу носіїв у каналі між квантовою ямою і точками. Вбудовування потенціальної КТ у гетероперехід змінює і картину розподілу напруженості поля в транзисторі – у потенціальній ямі з КТ напруженість максимальна, що зумовлює зростання дрейфової швидкості. Як видно з рис. 5.27, дрейфова швидкість носіїв у гетеротранзисторі

з КТ майже на порядок вища, ніж у ПТШ без вбудованих неоднорідностей. Це викликано тим, що, по-перше, носії рухаються у квантовій ямі майже без зіткнень, а по-друге, зростання середньої швидкості електронів пов'язане з іонізацією КТ й інжекцією електронів у канал. Інжектвані з КТ електрони мають меншу початкову енергію, що зумовлює зниження енергії всього колективу носіїв. Крім того, наявність КТ викликає квантування оптичних фононів, знижуючи ймовірність оптичного розсіяння. Описані чинники приводять до зростання дрейфової швидкості – це пов'язано з тим, що за малої кількості КТ не всі оптичні фонони квантуються, тому насичення швидкості настає скоріше.

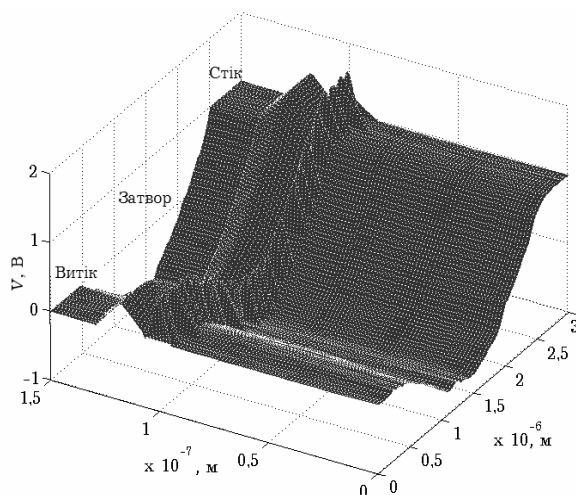


Рис. 5.26. Розподіл потенціалу в гетероструктурному транзисторі з КТ

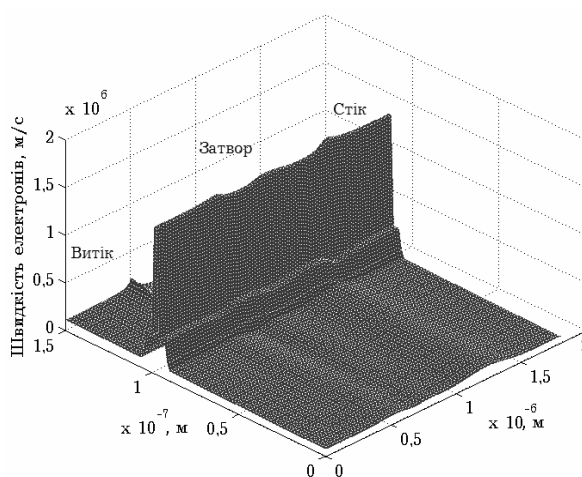


Рис. 5.27. Дрейфова швидкість носіїв у гетеротранзисторі з КТ

Наведені результати дозволяють описати механізм підвищення дрейфової швидкості електронів. Отримані характеристики для поля, швидкості й концентрації носіїв дозволяють робити висновки як про розподіл цих характеристик у структурі транзистора, так і про їх кількісні показники. Аналіз результатів моделювання показує, що вбудовування в гетеротранзистор навіть невеликої кількості КТ приводить до помітного зростання швидкості дрейфу носіїв у каналі транзистора.

Розв'язок системи рівнянь дозволяє також визначити розподіли електронної температури (рис. 5.28) і концентрації носіїв

заряду (рис. 5.29). У розрахунках часів релаксації враховувалися такі механізми розсіяння: для часу релаксації імпульсу τ_p – акустичне, домішкове, оптичне, полярне оптичне й міждолинне розсіяння, а для часу релаксації енергії τ_E – ті самі, що і для часу релаксації імпульсу, але без урахування домішкового розсіяння. Відомо [8], що зі всіх механізмів розсіяння в багатодолинних напівпровідниках найбільшу роль відіграють оптичне полярне і міждолинне розсіяння. В області підвищення електронної температури час релаксації імпульсу для полярного оптичного розсіяння істотно перевищує час релаксації імпульсу для міждолинного. Зворотний час релаксації енергії для полярного оптичного розсіяння зменшується зі зростанням T_e , оскільки розсіяння енергії пов'язане переважно з міждолинними переходами.

Аналіз розподілів температури електронного газу (рис. 5.28) і зворотного часу релаксації імпульсу та енергії для міждолинного розсіяння дозволяють зробити висновок, що області сильного розігрівання носіїв (максимуми T_e) й області максимальних значень $1/\tau_p$ і $1/\tau_E$ збігаються.

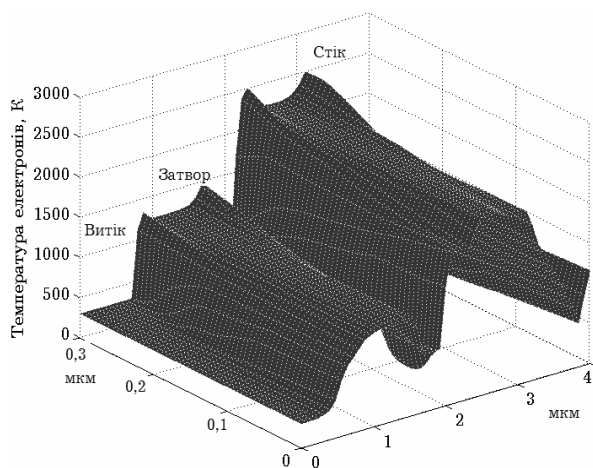


Рис. 5.28. Розподіл електронної температури

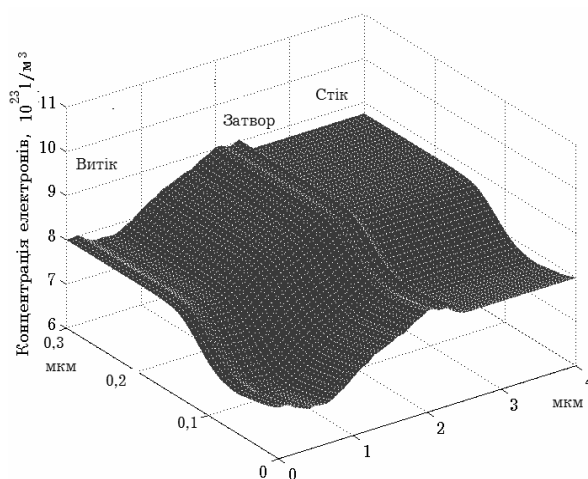


Рис. 5.29. Розподіл концентрації носіїв заряду

У разі вбудовування в канал гетеротранзистора КТ частина носіїв витісняється з каналу (рис. 5.29) і просторова локалізація носіїв у гетеротранзисторі з КТ відбувається в області, що примикає до стоку, і в підкладці. Область максимальних значень

дрейфової швидкості біля стоку збігається з областю максимальних значень концентрації рухливих носіїв, що може пояснити ефект зростання дрейфової швидкості носіїв у гетеротранзисторах із КТ порівняно з традиційними структурами.

У структурах з тонкими функціональними шарами також слід враховувати дискретизацію енергетичного спектра і ферміївський характер заповнення відповідних двовимірних енергетичних підзон квантування. Це можливо за допомогою самоузгодженого розв'язання рівнянь Пуассона і Шредінгера:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = \frac{-\rho}{\varepsilon \varepsilon_0};$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi(x, y) + [U(x, y) - E_0] \psi(x, y) = 0,$$

де E_0 – енергія основного рівня квантування.

Для розрахунку концентрації носіїв заряду в області квантової ями слід брати до уваги, що у двох інших напрямках електрони рухаються вільно, формуючи підзони розмірного квантування. Концентрацію рухливих носіїв заряду без урахування вигину зон знаходять інтегруванням за станами підзони з урахуванням розподілу Фермі–Дірака:

$$n(x, y) = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right] |\psi(x, y)|^2.$$

Енергії підзон розмірного квантування у наближенні прямокутної симетричної квантової ями [127] можна визначити за формулою

$$\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2m^* U_0}} = \frac{n\pi - ka}{2}.$$

Використовуючи заміну $\cos(\xi) = \pm \gamma \xi$ за n непарного та $\sin(\xi) = \pm \xi \gamma$ коли n парне, отримаємо для рівних значень енергій співвідношення

$$E = \frac{2\xi^2 \hbar^2}{m^* a^2}.$$

Для досягнення більшої точності потрібно розв'язувати рівняння Шредингера чисельними методами, але для оцінювання положення основного енергетичного рівня можна скористатися припущенням про «мілку» квантову яму, для якої положення основного рівня оцінюється за формулою

$$E_0 \approx U_0 - \frac{m^* a^2}{2\hbar^2} U_0^2.$$

Для довільної частки алюмінію у сполуці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ енергія спорідненості до електрона становитиме $(4,07 - 1,1x)$ еВ за $x < 0,45$ і $(3,64 - 0,14x)$ еВ за $x > 0,45$, а розрив зон провідності $\Delta E_c = \chi_{\text{GaAs}} - \chi_{\text{AlGaAs}} \approx 0,4$ еВ за $x = 0,35$.

Якщо у гетероструктурі є неоднорідність у вигляді квантових точок, то квантування спектра електронів у них має враховуватися окремо через обчислення положень енергетичних рівнів у відповідній КТ.

Для визначення енергетичних рівнів у сферично симетричній квантовій точці з арсеніду індію скористаємося методом, запропонованим у навчальному посібнику [128].

Глибина потенціальної ями в зоні провідності $\Delta E_c = \chi_{\text{InAs}} - \chi_{\text{GaAs}} = 0,83$ еВ. Розглянемо рівняння:

$$\sqrt{X - Y} = -\sqrt{Y} \operatorname{ctg}\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{Y}\right),$$

де $X = E / E^*$; $E^* = (\hbar^2 / 2m^*)(\pi / 2a)n^2$; a – ширина потенціальної ями; $n = 1, 2, 3$; $X = U_0 / E^*$ U_0 – висота стінок ями.

Аналіз останнього рівняння показує, що воно може мати розв'язок за $n - 0,5 \leq \sqrt{Y}$, тоді в КТ з такими параметрами буде один рівень енергії: $E_{\text{КТ}} = 0,036$ еВ.

Енергетичну діаграму для гетеротранзистора з КТ у поперечній до площини каналу проекції зображено на рис. 5.31. У поздовжній проекції КТ в каналі можна вважати квантовими ямами, що чергуються, тобто структурою, аналогічною надграткам. Відмінність полягає в мірі обмежень носіїв заряду. Тут може використовуватися наближення про прямокутну

форму квантових точок, хоча ймовірніше, що в процесі зростання, зокрема й за механізмом Странські–Крастанова, на межі гетеропереходу утворюються КТ сферичної форми. В умовах сильних полів, як показують розрахунки, відмінність положень енергетичних рівнів у КТ в прямокутному і сферичному наближенні не є істотними.

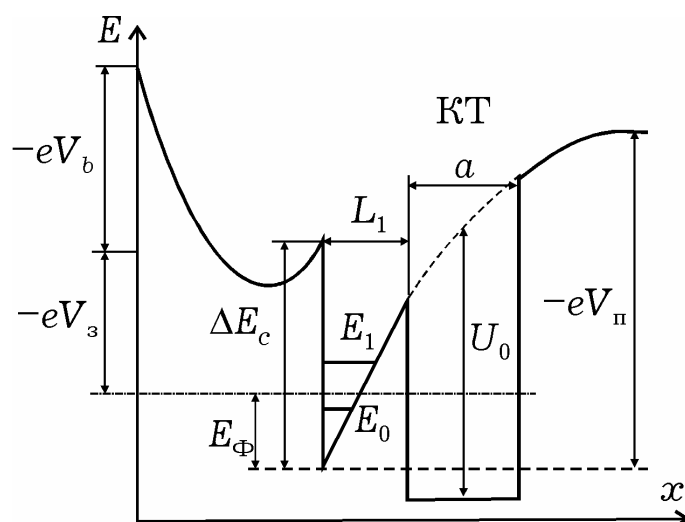


Рис. 5.30. Діаграма зони провідності структури гетероперехідного транзистора з КТ: U_0 – висота потенціального бар'єра КТ; a – її ширина

Емісія електронів із квантових точок можлива за рахунок ударної іонізації, тунелювання носіїв з КТ до квантової ями (КЯ) і в результаті теплових викидів носіїв. Імовірність теплових викидів носіїв через взаємодії з коливаннями кристалічної ґратки оцінювалася за допомогою больцманівського множника [129]: $\delta = \exp(-\Delta E_a / k_B T)$, де $E_a = U_0 - E_i$.

Прискорення електронів до порогу ударної іонізації квантових точок залежить від співвідношення двох чинників – прискорення у зовнішньому електричному полі й розсіювання у результаті зіткнення з фононами, переважно з полярними оптичними й міждолинними. Отриманий за допомогою розв'язання системи релаксаційних рівнянь розподіл електронної температури враховує ці чинники, і подія іонізації відбувається, якщо значення електронної температури достатнє в місці розташування КТ. У розрахунках іонізація КТ враховується за припущення, що енергія, передана локалізованому в КТ носію заряду, витрачається на подолання

потенціального бар'єра і викиди цього носія з КТ, а в канал транзистора електрон інжектується з початковою енергією, яка дорівнює енергії основного рівня КТ, з якого відбулася емісія.

Зі збільшенням розмірів КТ відстань між енергетичними рівнями стає співмірною або меншою за $k_B T$ й енергетичний спектр квантової ями стає квазінеперервним. Квантову точку з площею 1 мкм^2 вже можна розглядати з погляду класичної теорії, тоді на рух носіїв впливає форма зміни потенціалу в області КТ. У цьому випадку збільшення дрейфової швидкості пов'язане з тим, що носії на якийсь час все одно захоплюються КТ і, втрачаючи енергію, емітуються «охолодженими».

Для врахування впливу тунелювання потрібне оцінювання коефіцієнта тунелювання, наприклад, для трикутного бар'єра, під час переходу електронів з КТ у квантову яму (рис. 5.30). Також необхідною умовою (нехтуючи впливом розсіювання на розширення квантових рівнів) є збіг рівнів енергій. Обчислені положення рівнів для КТ і квантової ями в одновимірному наближенні дають збіг лише верхніх рівнів, для яких коефіцієнт проходження майже дорівнює одиниці. Для потенціального бар'єра з шириною a і в разі виконання умови $(2m^* E / \hbar^2) a \gg 1$, $(2m^* E / \hbar^2) a |1 - E / U_0| \gg 1$, можна використувати вираз за $E < U_0$:

$$D(E) \approx 4\sqrt{\alpha(1-\alpha)} \exp\left[-\frac{4}{3}\sqrt{\gamma(1-\alpha)^3}\right],$$

де U_0 – висота потенціального бар'єра; E – рівень, з якого відбувається тунелювання; $\alpha = E / U_0$; $\gamma = U_0 / E_1$; $E_1 = \hbar^2 / (2m^* a)$.

Імовірність тунелювання з інших рівнів КТ незначна. У площині розташування КТ, паралельній площині каналу, тунелювання між КТ може бути враховане в разі зв'язаних КТ або за наявності вертикально зв'язаних шарів КТ. У разі ізольованих КТ коефіцієнт проходження також прямує до нуля. Якщо на затвор подати від'ємну напругу, ширина трикутного бар'єра між квантовою ямою і КТ зростатиме, отже, дедалі

менше електронів зможуть тунелювати крізь нього, тоді вирішальним чинником іонізації КТ стає ударна іонізація.

Як було показано у статті [121], введення шару КТ в канал гетеротранзистора сприяє квантуванню фононного спектра в трьох напрямках, тоді як на гетеромежах відбувається розділення полярних оптичних фононів лише в напрямку, поперечному руху електронів, а додаткове розсіяння на інтерфейсних фононах приводить до майже однакових швидкостей розсіяння і в об'ємних, і в шаруватих структурах.

Зростання струму з урахуванням впливу КТ становить 10...15 %, що більшою мірою досягається не за рахунок збільшення концентрації рухливих носіїв, емітованих з КТ, а за рахунок збільшення середньої дрейфової швидкості потоку носіїв. Це пояснюється тим, що емітовані з КТ електрони провідності матимуть великі початкові швидкості порівняно з електронами в каналі. Оскільки в процесі самоорганізації КТ у площині каналу транзистора можуть розміщуватися нерівномірно й випадково, це можна врахувати у дослідженні відтворюваності характеристик гетеротранзисторів з КТ. Розподіли середньої дрейфової швидкості носіїв за однакової концентрації КТ, але з різним розміщенням, показано на рис. 5.31 [131].

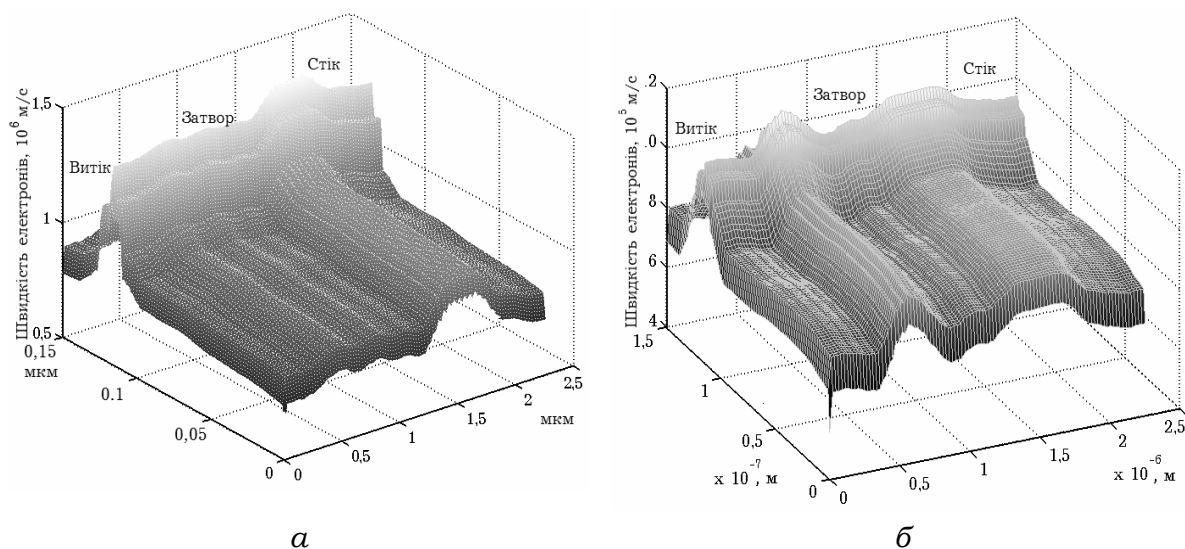


Рис. 5.31. Розподіл середньої дрейфової швидкості носіїв для гетеротранзисторів з КТ у разі локалізації КТ в каналі біля стокового (а) і витокового (б) країв затвора

Випадкове розміщення КТ у каналі транзистора спричиняє локальну неоднорідність розподілів концентрації носіїв, електричного поля, а також середніх значень дрейфової швидкості.

Результати розрахунку вихідного струму транзистора з концентрацією квантових точок у каналі $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ і їх порівняння з експериментом показано на рис. 5.32 [132; 133]. Розміри і форма КТ вважалися однаковими, змінювався лише спосіб їх розміщення в каналі.

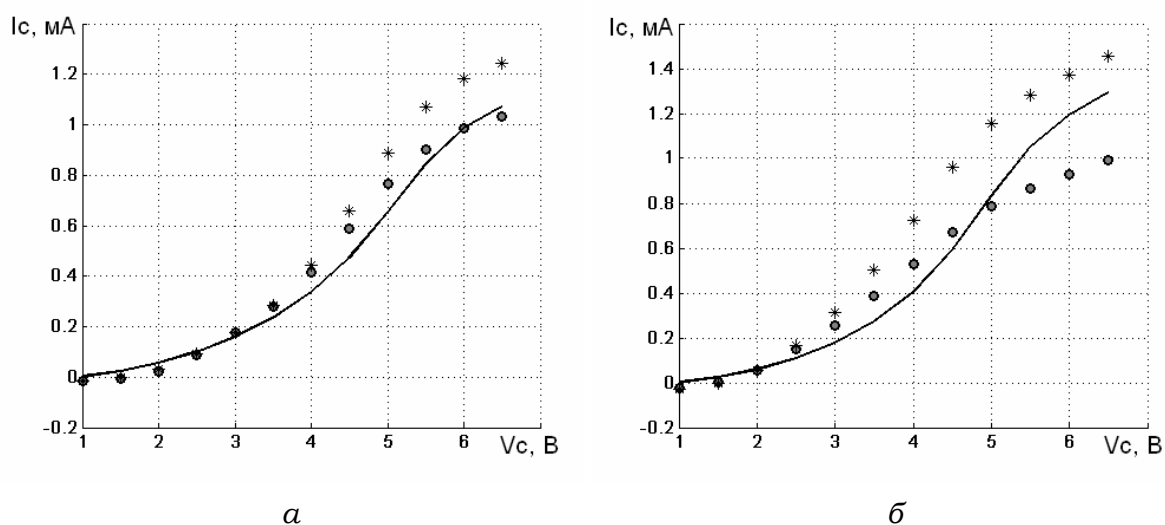


Рис. 5.32. Вольт-амперна характеристика гетеротранзистора з КТ: суцільна лінія – експеримент; точки – результати розрахунків для концентрації КТ $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$; $V_d = 0 \text{ В}$ (а); $V_d = -0,8 \text{ В}$ (б)

За тієї самої концентрації КТ у каналі спосіб їх розміщення помітно впливає на значення початкового струму. Таким чином, підтверджується вплив невизначеності в розміщенні КТ на початкові характеристики транзистора, що, очевидно, є однією з причин їх відхилення від експериментальних даних.

Рекомендована література: [8]; [95]; [96]; [97]; [98]; [99]; [100]; [101]; [102]; [103]; [104]; [105]; [106]; [107]; [108]; [109]; [110]; [111]; [112]; [113]; [114]; [115]; [116]; [117]; [118]; [119]; [120]; [121]; [122]; [123]; [124]; [125]; [126]; [127]; [128]; [129]; [130]; [131]; [132]; [133].

6. ПОТУЖНІ НАДВИСОКОЧАСТОТНІ ТРАНЗИСТОРИ

Підвищення потужності НВЧ-транзисторів зазвичай забезпечується збільшенням струму стоку, що досягається за рахунок збільшення ширини затвора [134; 135], при цьому транзистор секціонується й окремі секції з'єднуються паралельно. У роботі [134] описано конструкцію і характеристики гетероструктурного польового транзистора з вихідною потужністю 110 Вт, створеного на основі сполук AlGaN/GaN на підкладці з карбїду кремнію. Збільшення потужності досягається, по-перше, «меандровою» конструкцією затвора з його загальною довжиною 5,52 мм, розміром чипа $2,7 \times 0,6 \times 0,1$ мм (рис. 6.1, а). По-друге, кожний транзистор включає чотири чипа, з'єднаних паралельно, та узгоджувальні елементи (рис. 6.1, б). Однією з головних проблем під час їх конструювання є забезпечення необхідного тепловідведення для створення безпечного температурного режиму.

6.1. ПОТУЖНІ СУБМІКРОННІ ПОЛЬОВІ ТРАНЗИСТОРИ ШОТТКІ

У потужних польових транзисторах НВЧ з бар'єром Шотткі, а також транзисторах, що працюють у режимі великого сигналу, за деяких значень живильної напруги розігрівання може досягати досить високих температур. Це приводить до саморозігрівання транзистора і, як наслідок, до зміни його електричних характеристик. Окрім того, в субмікронних польових транзисторах спостерігається розігрівання електронів сильним електричним полем і в результаті температура електронного газу може досягати декількох тисяч кельвінів. Розподіл електронів за енергіями (й отже, за температурами) уздовж структури транзистора має яскраво виражений максимум біля стічного краю затвора, що пов'язано з розігріванням

електричним полем і переважно міждолинним розсіянням з наступною релаксацією в міжелектродному просторі «затвор-стік». Тому доцільно дослідити взаємний вплив електродинамічних і теплових параметрів, а також розподіл теплових полів по структурі транзистора.

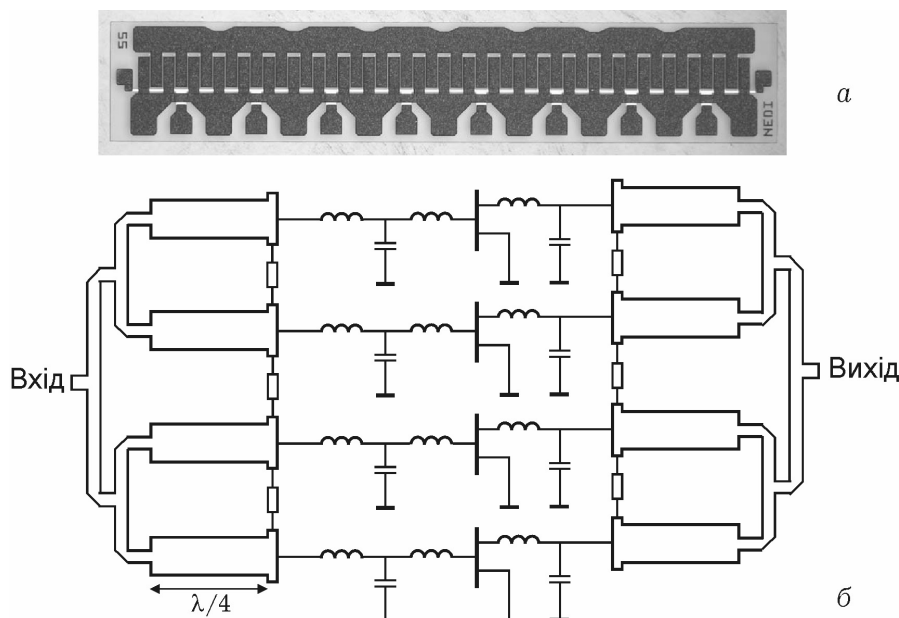


Рис. 6.1. Фотографія окремого чипа AlGaIn/GaN HEMT (а) та схема з'єднання чотирьох чипів (б) у конструкцію транзистора з узгоджувачими елементами [134]

Хоча вплив температури на параметри польових приладів не такий істотний, як у біполярних приладах, для потужних субмікронних НВЧ-транзисторів багато граничних параметрів пов'язані з перегрівом, викликаним струмом, який проходить. На експериментальному рівні такий аналіз не реалізовується, але необхідний для оптимального проектування як окремих транзисторів, так і монолітних пристроїв НВЧ. Самоузгоджений аналіз теплових і електронних процесів у транзисторних структурах фактично неможливий через різний масштаб модельованих явищ: електронні процеси перебігають в активній області транзистора з розміром 0,1...1 мкм, аналіз же теплових явищ пов'язаний з областю моделювання до 100 мкм.

Щоб урахувати вплив саморозігрівання струмом, що проходить, на параметри потужного польового транзистора слід заздалегідь проаналізувати теплові поля всієї транзисторної

структури. Результати цього аналізу дозволяють надалі розрахувати тепловий стан в активній області транзистора і змоделювати їх вплив на електронні процеси в каналі та, відповідно, на параметри транзистора.

Для попереднього теплового аналізу використовується ряд припущень. Так, розглядається лише монокристалічна пластина напівпровідника (рис. 6.2, а) із заданням на її поверхні контакту з підкладкою граничних умов першого роду (температуру беруть постійною, рівною 20 °С). Оскільки основне тепловиділення реалізується у досить тонкому шарі порядку 0,1 мкм, то вважається, що тепловий потік підводиться до ділянки зовнішньої поверхні, яка відповідає зоні тепловиділень. Інші обмежувальні поверхні вважаються адіабатичними. Вважають, що матеріал пластини (GaAs) ізотропний, теплофізичні параметри матеріалу постійні й не залежать від температури. Для спрощення задачі дослідження слід звернути увагу на такі особливості цього об'єкта: верхня обмежувальна поверхня ($y = 0$) пластини може бути умовно поділена на дві зони – центральну, в якій розміщені електроди і реалізуються дисипативні тепловиділення, і периферійну, де таких електродів немає. У зв'язку з цим цікаво оцінити величини можливих теплоперетоків у периферійну зону і їх вплив на максимальну температуру транзистора.

Можна помітити певну повторюваність (періодичність) у розміщенні електродів і зон тепловиділень. Зважаючи на це спостерігається і відповідна повторюваність, просторова періодичність температурних полів. Це дає змогу під час розв'язання теплової задачі у першому наближенні враховувати не всю область, а обмежитися розглядом лише окремого, спеціальним чином виділеного в ній елемента. Схему виділення такого елемента показано на рис. 6.2, б – фрагмент поздовжнього перерізу ($z = 0$) проходить через середину центральної зони. Область дослідження може бути зменшена ще удвічі, якщо взяти до уваги, що в межах виділеного елемента спостерігається геометрична і тепла симетрія. Зазначимо, що зважаючи

на відтоки теплоти уздовж осі абсцис у периферійну зону, вказана теплова симетрія виконується, строго кажучи, тільки для одного центрального елемента, проте саме цей елемент і є найбільш цікавим, оскільки тут реалізується максимальне значення температури.

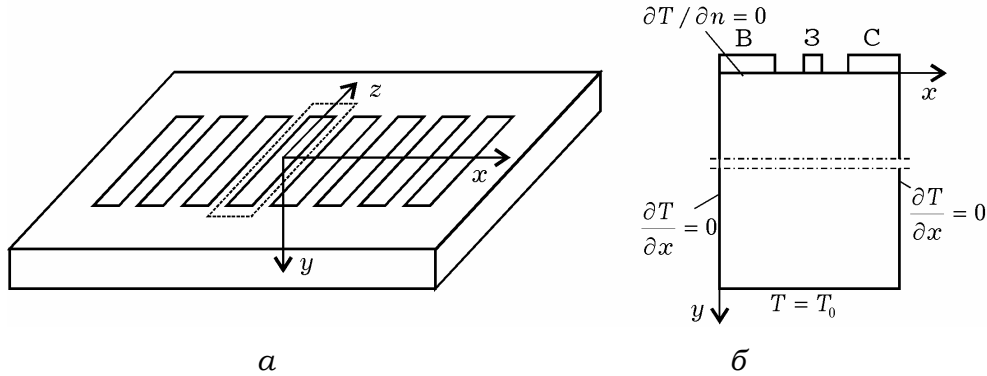


Рис. 6.2. Структурна схема багатосекційного транзистора (а) і поперечний переріз модельованого фрагмента (б)

У загальному випадку рівняння теплопровідності належить до диференціальних рівнянь у частинних похідних параболічного типу:

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla(k \nabla T) + h(T - T_{ext}) = f$$

в області Ω з початковими умовами $T(x, 0) = T_0(x)$ для $x \in \Omega$.

У стаціонарному випадку перший доданок дорівнює нулю і рівняння зводиться до рівнянь еліптичного типу:

$$-\nabla(k \nabla T) + h(T - T_{ext}) = f.$$

Граничні умови визначені як умови Діріхле на контактах й однорідні умови Неймана на вільних межах.

Розв'язуючи рівняння теплопровідності у стаціонарному наближенні, знаходимо розподіл температури у структурі, де ρ – густина теплового потоку, Вт/м²; C – теплоємність, Дж/К; k – коефіцієнт теплопровідності, 30 Вт/мК; h – коефіцієнт конвективного теплообміну, Вт/(м²·К); T_{ext} – зовнішня температура, К; f – джерело тепла, що підводиться, Вт/м² [136–139].

За такої постановки задачі розв'язання рівняння теплопровідності може бути отримане аналітично методом розділення

змінних Фур'є. Оскільки основне тепловиділення відбувається в дуже тонкому шарі (близько 0,2 мкм), то вважається, що цей шар є джерелом тепла з боку затвора.

Як видно з рис. 6.3, а, у транзисторі помітні поздовжні й поперечні теплові потоки з високотемпературної області в периферійні області кристала, де тепловиділення немає. Поблизу затвора високотемпературна область має багатовимірний характер, а далеко від цієї зони і в глибині кристала – майже одновимірний характер.

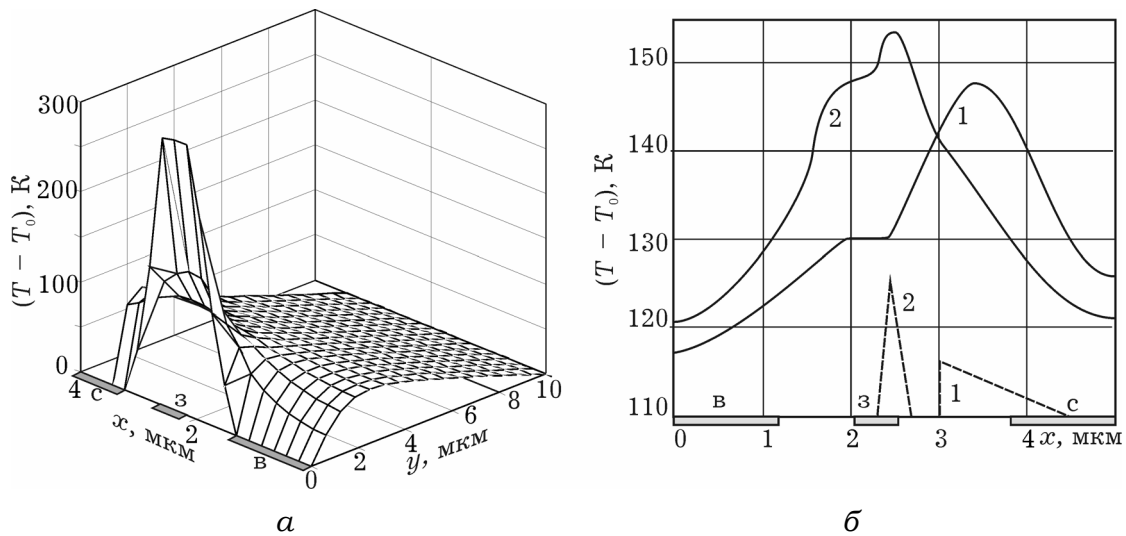


Рис. 6.3. Розподіл температури в субмікронному ПТШ

Отже, тепловий потік направлений переважно по товщині кристала (уздовж осі y), поширення теплового потоку вздовж осі x нехтовно мале. Область з підвищеною температурою безпосередньо примикає до провідного каналу транзистора.

Зазначена особливість дозволяє, використовуючи метод локалізації граничних умов, істотно спростити наступне розв'язання задачі за рахунок поетапного уточнення результатів [140]. На другому етапі розглядається не вся початкова область, а лише її частина – зона локалізації, що включає активну область транзистора з найближчим оточенням. Оскільки зона локалізації відносно невелика, то можна використовувати досить дрібну її дискретизацію, що забезпечує високу точність отримуваних результатів. При цьому на нижній межі області

задається температура, визначена на першому етапі, а на верхній дисипативні тепловиділення задаються у вигляді деякої епюри розподілу густини потужності, що тою чи іншою мірою імітує розподіл джоулевого тепла в каналі транзистора. Результати розрахунків для різних епюр подано на рис. 6.3, б. Форма епюр теплопідведення істотно впливає на розподіл температури лише в деякій підобласті, що безпосередньо примикає до місця їх задання. У міру віддалення вглиб кристала ця відмінність дедалі більше згладжується, багатовимірні поля, що відповідають різним епюрам, стають фактично однаковими і, більше того, на досить великій глибині багатовимірний процес у кристалі трансформується в одновимірний.

Отримані розподіли температурних полів показали, поперше, що в поперечному перерізі каналу зміна температури через малу товщину епітаксialного шару становить частки градуса, тому розподіл температури уздовж каналу можна з хорошим наближенням вважати за одновимірний. По-друге, шар металізації затвора «вирівнює» температуру безпосередньо в підзатворній частині каналу. Найбільші градієнти температури і відповідно пік її розподілу припадають на ділянку каналу між стоком і затвором, де переважають процеси швидкісної й енергетичної релаксації електронів.

Отже, область ефективного керування рухом носіїв полем затвора та область найбільшого тепловиділення просторово розділені, а отримані результати є хорошим аргументом для використання квазідвовимірної моделі транзистора (див. розд. 4), в якій температуру каналу можна вважати постійною і залежною тільки від потужності дисипативних виділень.

Подальша процедура моделювання впливу саморозігрівання на параметри транзистора полягає в розрахунку статичного режиму і динамічних малосигнальних параметрів за кімнатної температури. Залежно від потужності, що виділяється, за результатами теплових розрахунків визначалася температура каналу, для якої проводилося повторне моделювання електрич-

них параметрів. Деякі результати таких розрахунків подано на рис. 6.4 [141].

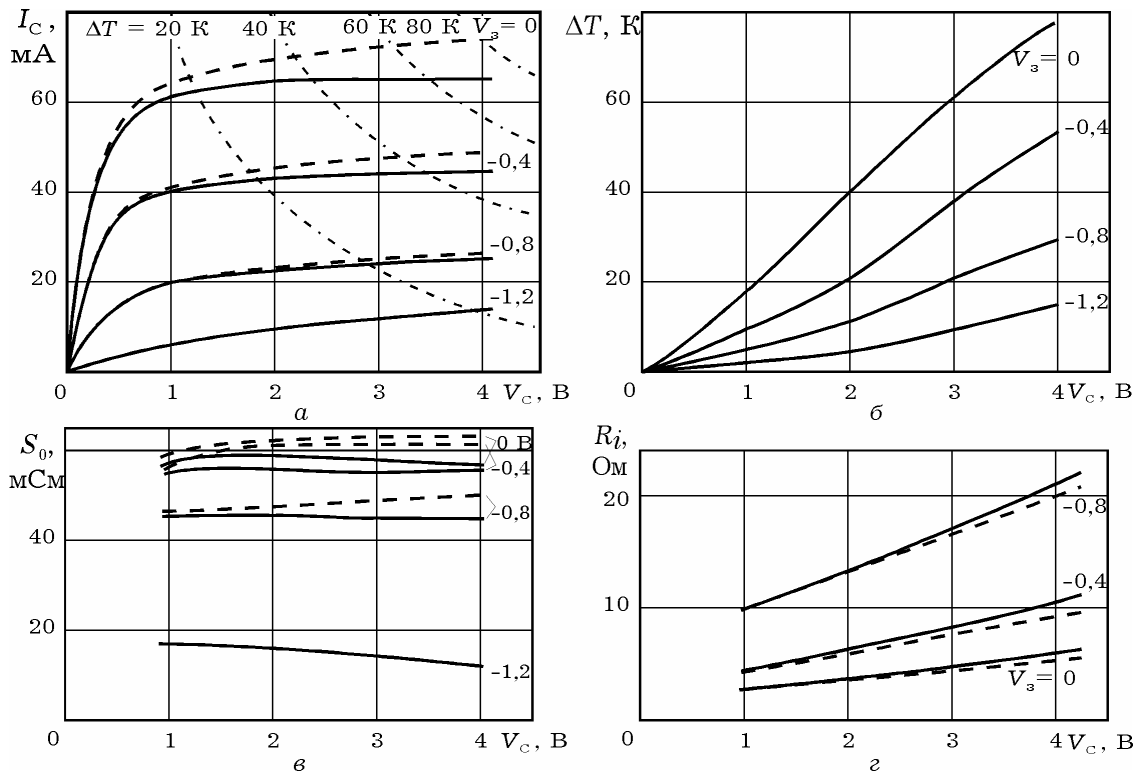


Рис. 6.4. Залежності струму стоку (а), перегріву каналу (б), крутизни (в) і внутрішнього опору каналу (г) від стічної напруги з урахуванням саморозігрівання (суцільні лінії) і без нього (штрихові лінії) (значення наведено в перерахунку на ширину затвора транзистора 300 мкм)

Підвищення температури найпомітніше позначається на значеннях струму стоку і деяких «резистивних» параметрах схемної моделі. Зменшення струму стоку (а) і відповідне зменшення крутизни (в), особливо помітне у відкритому каналі, легко пояснюється зменшенням рухливості за рахунок нагрівання і впливу на час релаксації та поле-швидкісні характеристики. Фактично з цієї ж причини збільшується опір каналу (б).

Дещо несподіваною виявилася відсутність помітного впливу саморозігрівання на вихідну провідність. Попри помітне зменшення нахилу статичних ВАХ (рис. 6.4, а) вихідна малосигнальна провідність, що визначається нахилом динамічної характеристики, фактично не змінюється, що викликано неспівмірністю часу встановлення теплової рівноваги і періоду НВЧ-коливань. По суті цією ж причиною пояснюється слабка

чутливість до розігрівання динамічних ємнісних параметрів схемної моделі транзистора.

Досить корисними для оцінювання граничних режимів транзистора є залежності перегріву каналу від живильної напруги, зображені на рис. 6.4, б, а також лінії постійної температури перегріву (штрихпунктирні лінії на тлі стокових ВАХ), які визначають допустиму розсіювану потужність.

Як показують результати моделювання, є області, в яких температура ґратки істотно, на 50...70 °С, перевищує рівноважну. Такими областями є, окрім каналу, області контакту витoku і стоку. Температура електронів під затвором може істотно відрізнитися від рівноважної унаслідок розігрівання і міждолинних переходів, при цьому «повільні» електрони верхніх долин зменшують середню дрейфову швидкість колективного руху, що приводить до процесів накопичення носіїв в області сильного електричного поля під затвором. Це означає, що для моделювання впливу розігрівання на електронні процеси в каналі транзистора слід враховувати відмінні від рівноважних значення енергії та швидкості носіїв.

Крім того, запропонована модель аналізу теплових процесів дозволяє досліджувати граничні з погляду розсіюваної потужності, режими роботи польових транзисторів із субмікронними розмірами активної області.

Отримані розподіли температур з екстремумом у приповерхневому шарі біля затвора свідчать про необхідність враховувати високі градієнти температур у процесі проектування і вибору топології, особливо вплив високих температур на електромеханічні властивості затвора і бар'єрного контакту. Спільне використання фізико-топологічних і теплових моделей субмікронних структур дозволяє також оптимізувати їх структуру, вихідні параметри і характеристики.

6.2. ПОТУЖНІ ГЕТЕРОСТРУКТУРНІ ПОЛЬОВІ ТРАНЗИСТОРИ

Для субмікронних транзисторних структур з гетероселективним легуванням у сильних полях характерні такі умови розігрівання транзисторної структури. Загальне підвищення температури транзисторної структури пов'язане з потужністю, що виділяється. Це підвищення температури можна обмежити за рахунок вибору конструкції, матеріалів тепловідводів і корпусу з відповідними значеннями теплових опорів. Унаслідок ефектів сильного поля під затвором і локального розігрівання електронного газу до температур, що досягають декількох тисяч кельвінів, перегрівання структури посилюється, що конструктивними прийомами усунути неможливо. Отже, опис саморозігрівання в реальних транзисторних структурах для визначення їх електротеплових режимів пов'язаний як із моделюванням теплових полів, так і з описом процесів в області сильного поля, де перегрівання найістотніше.

Як зазначалося в роботах [29; 142–146], зміна параметрів електронного газу внаслідок підвищення температури приводить до виникнення високих локальних градієнтів температури, які впливають як на електричні характеристики транзисторної структури, так і на параметри надійності транзистора. На відміну від типових польових структур, гетероструктури (рис. 6.5) – це багатошарові структури, в яких чергуються шари (гетеропереходи, квантові ями і потенціальні бар'єри) з високою електропровідністю і збіднені шари, близькі за властивостями до діелектрика. Моделювання теплових полів дозволяє оцінити розподіл температурних полів у структурі ГСПТ і вибрати режими стійкої роботи транзистора щодо температурного діапазону, а також виробити рекомендації з оптимального вибору конструкції транзистора і забезпечення тепловідведення в монолітних інтегральних схемах (ІС) НВЧ. Для врахування теплових ефектів

у ГСПТ можна використовувати два підходи. У першому випадку при моделюванні ефект саморозігрівання враховується введенням додаткових доданків до параметрів моделі, які визначаються в стаціонарних режимах. Ці доданки задаються рівняннями, що описують фізичні процеси ефектів саморозігрівання [146].

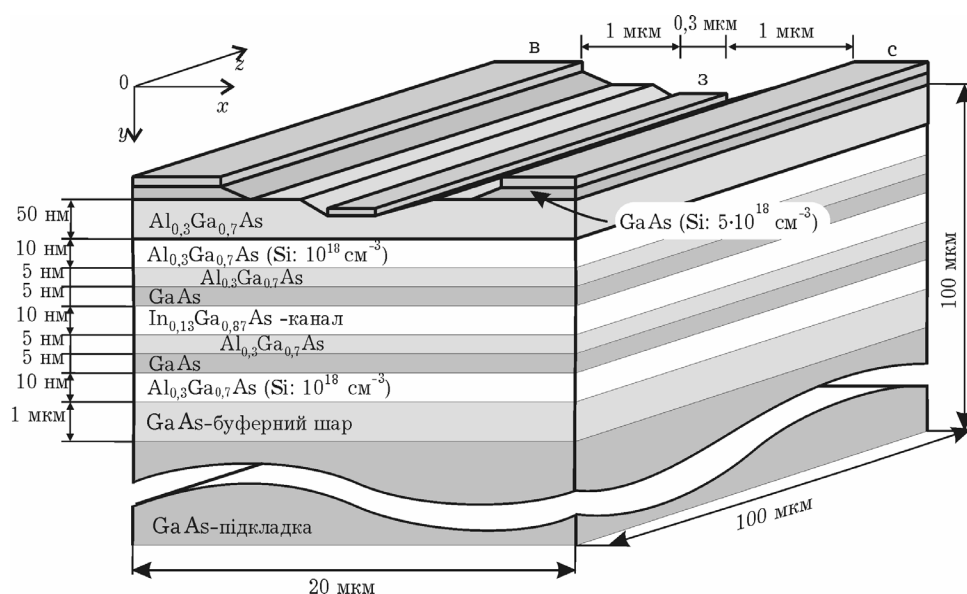


Рис. 6.5. Структура транзистора з гетероселективним легуванням

Для схемотехнічного моделювання у ці моделі включають додаткові, залежні від температури, джерела струму (рис. 6.6). Тоді сумарний струм $I_{\Sigma} = I_{dct} + I_{th}$, де I_{dct} – струм каналу транзистора, визначуваний у стаціонарному режимі; I_{th} – тепловий струм, що є функцією різниці напруги за рахунок зміни температури ΔT і протікає через «тепловий резистор» R_{th} та «теплову ємність» C_{th} , які залежать від температури і геометричних параметрів приладу.

Перевагою такого моделювання є простота розрахунку, оскільки параметри елементів моделі визначені у стаціонарному режимі, а вихідні характеристики розраховуються підсумовуванням напруги та струмів моделі, отриманих за нормальних умов, і додаткових джерел струму та напруги, величини яких апроксимують зміни струму або напруги залежно від температури транзисторної структури.

Другий підхід пов'язаний з урахуванням ефектів саморозігрівання транзисторної структури вже на стадії постановки обчислювальної задачі. Вводяться зворотні зв'язки в рівняння моделі між напругою, струмами цього елемента і зміною температури транзисторної структури унаслідок потужності, що виділяється. Тим самим здійснюється інтегральне оцінювання зміни характеристик транзистора залежно від фізичних процесів, викликаних ефектами саморозігрівання [147]. Проте введення зворотного зв'язку підсилює нелінійні властивості параметрів моделі, веде до її ускладнення і до збільшення жорсткості системи рівнянь, що описують роботу цієї транзисторної структури.

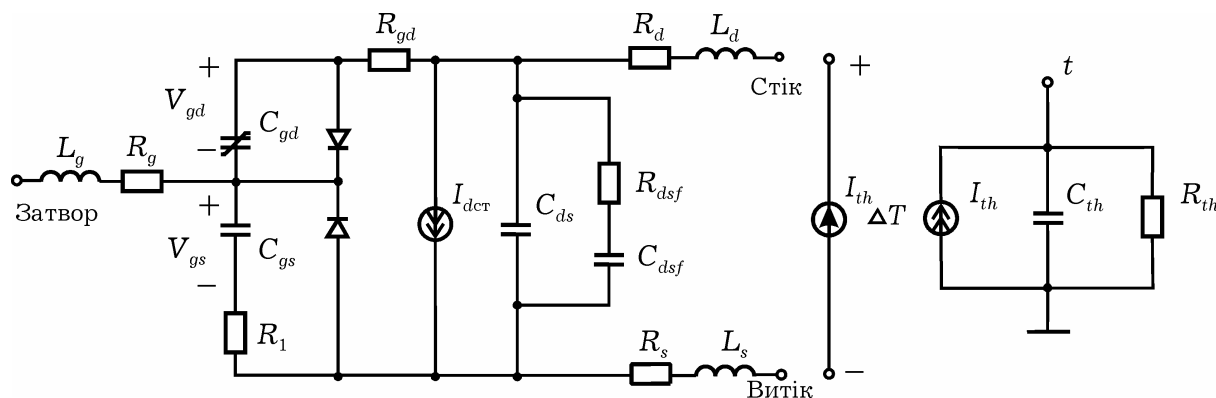


Рис. 6.6. Схемна модель гетеротранзистора з колами, що враховують саморозігрівання

Застосовуючи методику розрахунку розподілу температури з рівняння теплопровідності (див. підрозд. 6.1), отримаємо розподіли температури для транзисторних гетероструктур з довжиною затвора 1 і 0,4 мкм як показано на рис. 6.7, а і б відповідно. Зазначимо, що область розігрівання простягається від омичного контакту витіку, проходить через область сильного поля під затвором і досягає омичного контакту стоку. В результаті такого розігрівання порушується термодинамічна рівновага у приконтактних областях транзистора, що приводить до зростання енергії електронів, зменшення їх рухливості та збільшення паразитних опорів контактів.

З температурної залежності рухливості електронів [5] і з розподілу теплового поля транзисторної структури у площині

ху (рис. 6.7) видно, що рухливість електронів у підзатворній області порівняно з рухливістю електронів для 300 К може зменшуватися у декілька разів за умови типових рівнів легування областей ГСПТ.

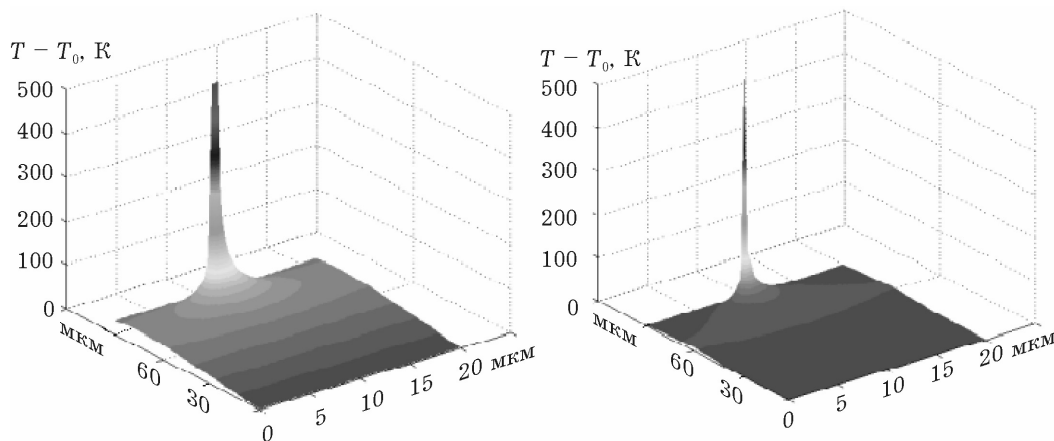


Рис. 6.7. Розподіли температури в гетеротранзисторах з довжиною затвора 1 мкм (а) і 0,4 мкм (б)

Окрім того, за рахунок перерозподілу електронів у потенціальних ямах можлива зміна потенціального рельєфу, особливо в області провідних шарів транзистора, що погіршує керування транзистора полем затвора і спричиняє зменшення крутизни транзистора. Отже, розподіл теплових полів у багатшарових гетероструктурах має ряд особливостей, які слід враховувати для вибору топології та конструкції транзистора з гетероселективним легуванням. Зокрема, вплив розглянутих ефектів можна послабити, зменшуючи активну область транзистора за рахунок зменшення як довжини затвора, так і товщини активних шарів транзистора.

За результатами двовимірного моделювання теплових полів у транзисторі з селективним легуванням і температурних залежностей рухливості можна оцінити швидкості дрейфу електронів у стаціонарному наближенні для апроксимацій та їх використання для розрахунків в аналітичних і одновимірних моделях. Окрім того, за розподілами теплових полів з урахуванням процедури усереднювання можна оцінити значення теплового опору для схемної моделі на рис. 6.6.

6.3. ГЕТЕРОБІПОЛЯРНІ ТРАНЗИСТОРИ

Підвищення швидкодії біполярних транзисторів можливе за використання для виготовлення емітера матеріалу з більшою шириною забороненої зони, ніж у матеріалу бази. Наприклад, перші гетеротранзистори мали емітер з n -GaAs, а базу з p -Ge. Згодом почали використовувати гетеропереходи на основі сполук $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ та ін.

На межі різних напівпровідників виникають електричні поля, які на енергетичній діаграмі (рис. 6.8) моделюються розривом дна зони провідності, рівним різниці енергій електронної спорідненості $\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2$, і розривом стелі валентної зони $\Delta E_v = (\Delta E_1 + \chi_1) - (\Delta E_2 + \chi_2)$. Разом з полем контактної різниці потенціалів $V_k = (\Phi_1 - \Phi_2)/e$ ці поля зменшують висоту потенціального бар'єра для електронів і збільшують його для дірок валентної зони. Асиметрія умов проходження електронів і дірок через емітерний перехід приводить до того, що струм інжекції дірок j_p зменшується в $\exp(\Delta E_v/kT)$ разів, а струм інжекції електронів j_n збільшується в $\exp(\Delta E_c/kT)$ разів. У результаті можна отримати коефіцієнт інжекції електронів $\gamma = j_n/(j_n + j_p)$ близьким до одиниці, що робить процеси рекомбінації дірок в емітері неістотними.

У звичайному гомопереході відношення електронної і діркової складових струму емітера визначається відношенням концентрації донорів в емітері та акцепторів у базі, що змушувало для збільшення коефіцієнта інжекції обмежувати ступінь легування бази. У гетеропереході можливе сильне легування базової області, що спричиняє зниження поздовжнього опору бази

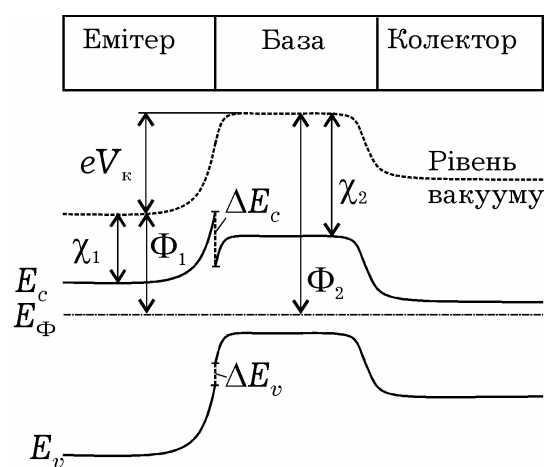


Рис. 6.8. Енергетична діаграма типового n - p - n -гетеротранзистора

і сталої часу заряду колекторного кола $\tau_k = R_b C_{k,b}$, яка істотно впливає на швидкодію транзистора у надтонких базах.

Крім того, на межі «емітер–база» електрони набувають додаткової кінетичної енергії, рівної ΔE_c , і за відповідної товщини бази може бути реалізований балістичний, або близький до нього, режим перенесення в вузькозонному матеріалі. Це зменшує час прольоту в базі, що є ще одним чинником підвищення швидкодії.

6.3.1. Двовимірне моделювання транзисторів

Вертикальну структуру субмікронного гетеробіполярного транзистора (ГБТ) показано на рис. 6.9. Передбачається, що такий транзистор розміщується на порівняно великій підкладці, яка істотно впливає на розподіл тепла.

До особливостей ГБТ належить наявність різнорідних фізичних процесів у емітерному гетеропереході та колекторному p – n -переході, а також процесів в області бази, яка в субмікронних транзисторах може становити кілька десятків нанометрів і зазвичай не перевищує 200 нм. Використання в емітері сполуки $Ga_{1-x}Al_xAs$ n -типу в контакті з p -легованою базою $GaAs$ створює потенціальний бар'єр не менше 0,25 еВ, що фактично виключає інжекцію дірок в емітері навіть у разі високого ступеня легування бази. Це дозволяє зменшити товщину бази без збільшення її опору, а також знизити небезпеку зімкнення переходів. Проте, як видно з результатів моделювання, ГБТ програють польовим субмікронним гетеротранзисторам за рівнем шуму [149]. Окрім того, в гетеробіполярних транзисторах слід враховувати ефекти саморозігрівання [150], які погіршують вихідні характеристики.

Завдяки новим можливостям технології, використанню нових напівпровідникових матеріалів і оптимізації топології ГБТ мають граничні частоти посилення понад 200 ГГц [151] і використовуються в широкому спектрі пристроїв міліметрового діапазону. Детальне моделювання процесів дрейфу і дифузії

може ґрунтуватись на двовимірній моделі активної області транзистора в гідродинамічному наближенні. Такі моделі дозволяють враховувати основні ефекти біполярних субмікронних структур: розігрівання електронів і дірок сильним електричним полем і пов'язану з ним зміну їх рухливості, процеси рекомбінації, ефекти сильного легування – зміну ширини забороненої зони і виродження напівпровідників.

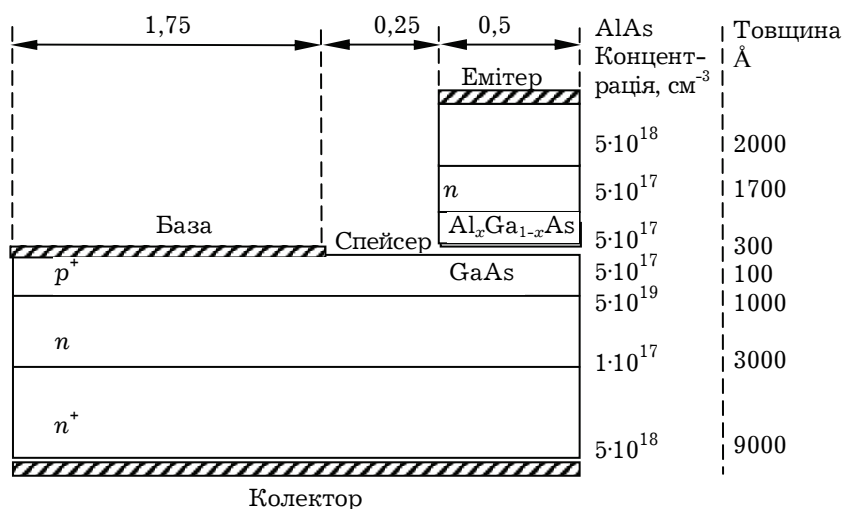


Рис. 6.9. Структура субмікронного гетеробіполярного транзистора (AlGaAs/GaAs)

У модельованій структурі транзистора (рис. 6.9) враховано симетрію щодо вертикальної осі реального ГБТ, що дозволяє розглядати тільки одну половину структури для зменшення обчислювальних витрат.

Процеси у внутрішній області транзистора в загальному випадку можуть бути описані рівнянням Пуассона:

$$\nabla^2 V = e \frac{n - p - N_d + N_a}{\epsilon \epsilon_0} \quad (6.1)$$

і рівняннями неперервності струму для електронів і дірок. Якщо для носіїв заряду справедлива статистика Максвелла–Больцмана, то ефекти сильного легування можна врахувати додатковими доданками в системі дифузійно-дрейфових рівнянь:

$$\text{div}[\mu_n(\nabla n - n \nabla \ln n_{ie} - n \nabla(V + \psi))] = R(p, n); \quad (6.2)$$

$$\text{div}[\mu_p(\nabla p - p \nabla \ln n_{ie} - p \nabla(V + \psi))] = R(p, n). \quad (6.3)$$

Така система з урахуванням рівняння Пуассона є повною, тут V – електричний потенціал; e – заряд електрона; n , p – концентрації електронів і дірок; $\epsilon\epsilon_0$ – діелектрична проникність; N_d , N_a – концентрації донорних і акцепторних домішок; μ_n , μ_p – рухливість електронів і дірок відповідно; R – швидкість рекомбінації носіїв заряду. У рівняннях (6.1)–(6.3) величини n_{ie} та ψ описують ефекти сильного легування. З використанням виразу для власної концентрації носіїв заряду $n_i = (N_c N_v)^{1/2} \exp(-E_g/2k_B T)$ може бути отриманий вираз для деякої ефективної власної концентрації носіїв заряду:

$$n_{ie} = n_i \exp\left[\frac{e\Omega_n + e\Omega_p}{2k_B T}\right] = n_i \exp\left(-\frac{\Delta E_g}{2k_B T}\right).$$

В останній формулі величину $e\Omega_n$ слід розуміти як звуження ширини забороненої зони з боку зони провідності, а величину $e\Omega_p$ – з боку валентної зони. Тоді величина $\Delta E_g = e\Omega_n + e\Omega_p$ є повним звуженням ширини забороненої зони. Точне аналітичне визначення величин $e\Omega_n$ і $e\Omega_p$ неможливе, надалі для моделювання їх обирають на основі експериментальних даних. Параметр ψ визначається як $\psi = e(\Omega_n - \Omega_p)/2$.

Залежності рухливості електронів і дірок від напруженості електричного поля розраховуються в наближенні часу релаксації для електронів і дірок.

Для розв'язання системи рівнянь використовують метод прогону в поєднанні з ітераційним багатокроковим методом Ньютона. Граничні умови для рівняння Пуассона задавалися як умови Діріхле на електродах (за електричного зміщення на емітері, базі й колекторі відповідно 0,0; 1,0 і 5,0 В) й однорідні умови Неймана на вільних і бічних межах.

У структурі транзистора використовувалися некомпенсовані напівпровідники з розподілом легувальної домішки як показано на рис. 6.10. Емітерний гетероперехід моделювався як стрибок потенціалу заввишки близько 0,4 еВ без урахування квантування енергетичних рівнів.

З аналізу результатів моделювання (рис. 6.11, 6.12) видно, що область сильного поля в ГБТ локалізується в міжелектродному проміжку «база–колектор» і примикає до області бази і p - n -переходу «база–колектор», а також поблизу емітерного гетеропереходу. Рухливість електронів і дірок максимальна в міжелектродному проміжку «емітер–база», що відповідає їх низькопольовим значенням поблизу «порогових» значень напруженості електричного поля і майже не змінюються в сильних полях, що відповідає розігріванню і міждолинним переходам електронів та утворенню гарячих дірок.

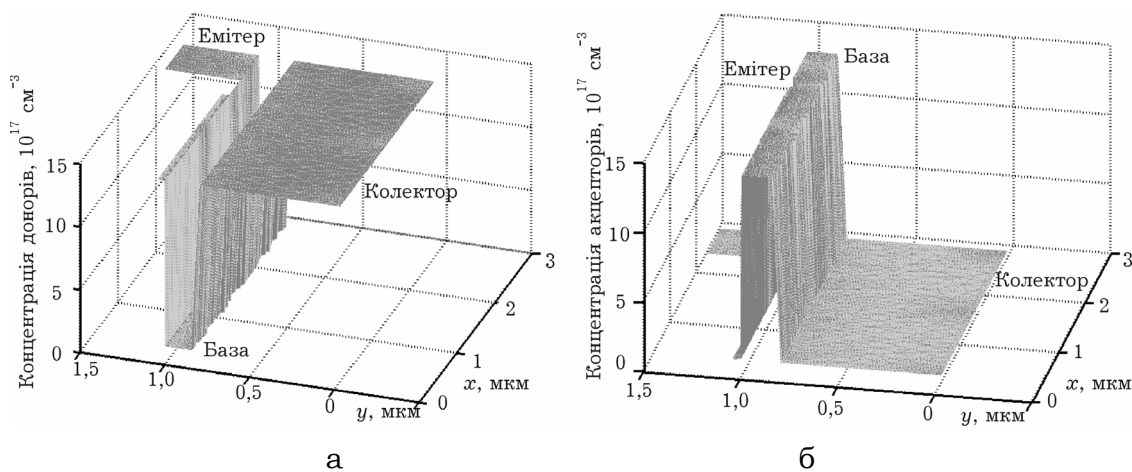


Рис. 6.10. Профіль легування донорами (а) й акцепторами (б)

Особливості структури і малі розміри активної області транзистора приводять до порівняно високих значень напруженості електричного поля в області колекторного переходу і колектора (більше $4 \cdot 10^7$ В/м), що пов'язано з розсіюванням великої потужності та з необхідністю оптимального вибору товщини області колектора.

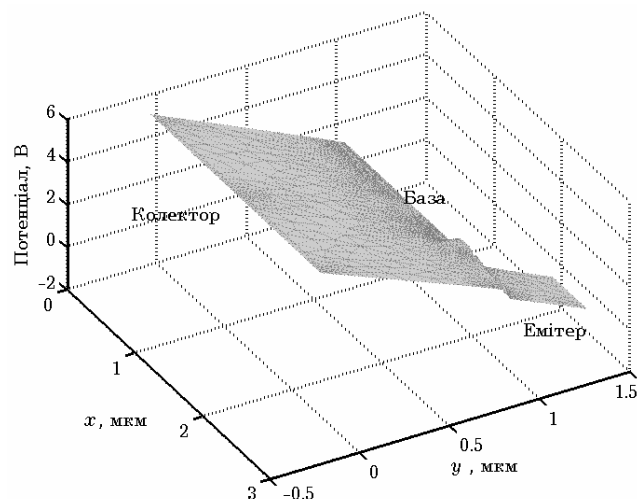


Рис. 6.11. Розподіл потенціалу в структурі гетеробіполярного транзистора

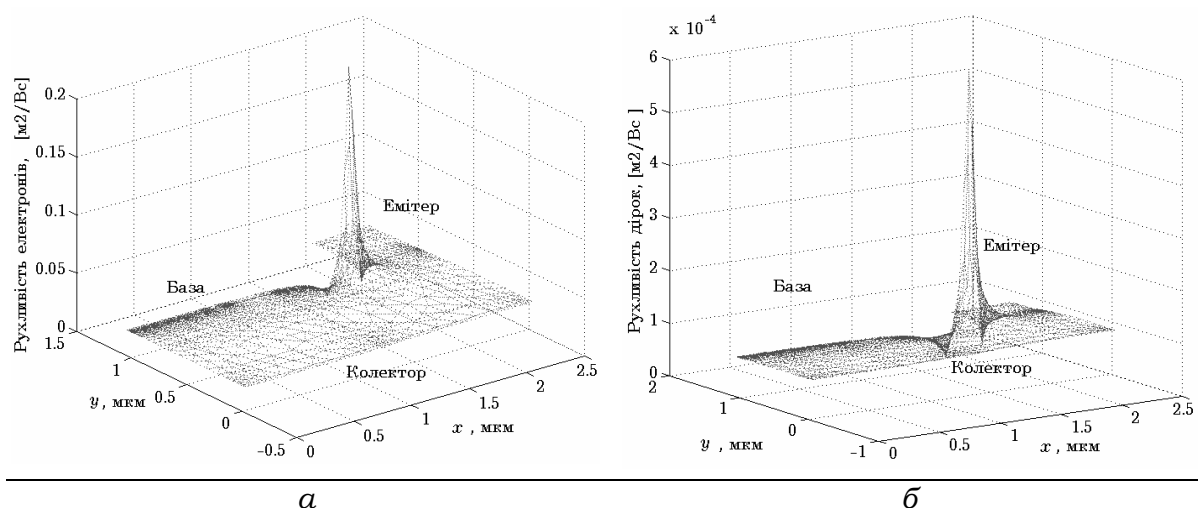


Рис. 6.12. Рухливість електронів (а) і дірок (б) у структурі транзистора

6.3.2. Моделювання розігрівних ефектів

Як показують результати аналізу фізичних процесів, у підзатворній області субмікронних ПТШ і ГСПТ та приколекторній області ГБТ є області сильного поля і розігрівання носіїв заряду. Актуальною, особливо для потужних структур, є задача дослідження впливу розігрівних ефектів. За рахунок додаткового розігрівання носіїв можливе погіршення параметрів транзистора, зумовлене як підвищенням температури кристалічної ґратки, так і розігріванням електронного газу в каналі, що приводить до зменшення рухливості електронів. Також доцільно визначити ступінь впливу розігрівних ефектів на параметри схемних моделей транзисторів і частотні характеристики.

Як правило, потужними транзисторами є багатосекційні структури, при цьому кожену секцію може бути подано у вигляді теплових джерел на поверхні підкладки, які моделюються з урахуванням функції розподілу густини потужності (потіку енергії). Таке дослідження можливе лише якщо проаналізувати [152, 153] рівняння Пуассона, рівняння неперервності струму для електронів і дірок, а також рівняння для потоку енергії у двовимірному наближенні та врахувати температурні поля, що виникають у транзисторі за рахунок протікання струму.

Розглянемо вертикальну структуру ГБТ, подібну до наведеної на рис. 6.9. Передбачається, що транзистор розміщено на досить великій підкладці, яка істотно впливає на розподіл і відведення тепла. При цьому слід враховувати, що розміри температурно-нерівноважної області істотно перевищують розміри електрично активної області, в якій взаємодіють потоки електронів і дірок з електричним полем. Ці особливості слід враховувати, задаючи граничні умови в модельованій області для опису теплових процесів. Область транзистора з тепловими полями за межами активної області транзистора може бути, наприклад, розглянута як певний додатковий резистор, що розсіює потужність. У модельованій структурі транзистора враховано симетрію щодо вертикальної осі реального ГБТ, що дозволяє розглядати тільки одну половину структури для зменшення обчислювальних витрат.

Активна область транзистора в загальному випадку може бути описана рівняннями Пуассона:

$$\nabla^2 V = \frac{e}{\epsilon \epsilon_0} (n - p - N_d + N_a), \quad (6.4)$$

рівняннями неперервності струму для електронів і дірок:

$$\nabla \vec{J}_n = e R_n; \quad (6.5)$$

$$\nabla \vec{J}_p = e R_p, \quad (6.6)$$

а також рівнянням для потоку тепла:

$$\nabla [c(T) \cdot \nabla T] = -P = \Delta \vec{J}_E, \quad (6.7)$$

де \vec{J}_n , \vec{J}_p – густина електронного і діркового струму відповідно; $c(T)$ – залежний від температури коефіцієнт теплопровідності; P – потужність, що розсіюється в одиниці об'єму; \vec{J}_E – густина енергетичного потоку.

Температурна залежність коефіцієнта теплопровідності для напівізолювального арсеніду галію може бути подана [154] апроксимацією $c(T) = 0,76 - 0,001 \cdot T$ (Вт/(см·К)), а для арсеніду галію n -типу з концентрацією $3,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ аналогічна

залежність може бути подана як $c(T) = 1/(aT - \epsilon)$, де $a = 9,2 \cdot 10^{-3}$, $\epsilon = 0,44$.

У роботі [155] окрім традиційних стаціонарних дифузійно-дрейфових складових струму електронів і дірок запропоновано спосіб урахування додаткових складових, а саме ефекти сильного легування, залежного від рівня інжекції, і температурну залежність коефіцієнта дифузії. З урахуванням цього рівняння для густини електронного і діркового струму запишемо:

$$\vec{J}_n = \mu_n \beta_n k_B T \nabla n - n \mu_n \left[\nabla (eV + \chi) + \beta_n k_B T \frac{\Delta N_c}{N_c} - \alpha_n k_B \nabla T \right]; \quad (6.8)$$

$$\vec{J}_p = -\mu_p \beta_p k_B T \nabla p - p \mu_p \left[\nabla (eV + \chi + E_g) - \beta_p k_B T \frac{\Delta N_v}{N_v} + \alpha_p k_B \nabla T \right]. \quad (6.9)$$

Як показано в роботі [156], вираз для густини потоку енергії можна записати як

$$\vec{J}_E = \left\{ -k_B [\alpha_n k_B T + E_c] \frac{\vec{J}_n}{e} - c_n \Delta T \right\} + \left\{ [\alpha_p k_B T - E_v] \frac{\vec{J}_p}{e} - c_p \Delta T \right\}, \quad (6.10)$$

де c_n і c_p – коефіцієнти теплопровідності для електронів і дірок відповідно.

У разі узгодженого розв'язання системи рівнянь (6.4)–(6.10) можна знехтувати випромінюванням тепла і конвективних потоків, а також незалежністю квазірівнів Фермі для електронів і дірок від температури. Ці припущення дозволяють розглядати напівпровідник, що включає підсистеми вільних носіїв заряду і ґратку, як термодинамічну систему.

Для аналізу ефекту розігрівання можливий також підхід, оснований на такому алгоритмі. На першому етапі розв'язуються дифузійно-дрейфові рівняння структури транзистора і рівняння Пуассона за кімнатної температури ґратки. Далі за результатами моделювання потужність розраховується з рівняння

$$P = - \int_V \left(\varphi_n \operatorname{div} \vec{J}_n + \operatorname{grad} \varphi_n \vec{J}_n + \varphi_p \operatorname{div} \vec{J}_p + \operatorname{grad} \varphi_p \vec{J}_p \right) dV.$$

За потужністю, що виділяється, розраховується температура активної області транзистора. Оскільки процеси тепловиді-

лення пов'язані з областю протікання струму через транзистор, то найбільше розігрівання зазвичай відбувається у приповерхневих шарах. Для ГБТ це область колектора. Розраховане таким чином значення температури задається як гранична умова Діріхле при моделюванні теплових полів у структурі транзистора при розв'язанні рівняння теплопровідності для отримання функції $T(x,y)$. На завершальному кроці здійснюється повторний перерахунок розподілів фізичних величин за рівняннями Пуассона і рівняннями неперервності для електронів і дірок, в яких температура кристалічної ґратки задається нерівноважною функцією $T(x,y)$, що дозволяє врахувати розігрівні ефекти за допомогою температурних залежностей коефіцієнтів дифузії та рухливостей для електронів і дірок.

Для інтегрального врахування розігрівання за відомою функцією $T(x,y)$ через усереднювання можна розрахувати еквівалентний тепловий опір R_t :

$$-c(T)\Delta T \cdot \vec{n} = \frac{(T - T_0)}{R_t},$$

де \vec{n} – одиничний вектор, нормальний до зовнішньої поверхні; T_0 – рівноважна температура. Тепловий опір знаходять з урахуванням розподілу температурних полів у підкладці транзистора і процедури усереднювання:

$$T_{\text{ср}} = \frac{1}{l_x l_y} \int T(x,y) dx dy; \quad R_t = \frac{T_{\text{ср}} - T_0}{Q},$$

де $Q = \frac{1}{l_x l_y} \oint \vec{I}_E \vec{n} da$; l_x і l_y – розміри модельованої області.

Приклад розрахунку теплових полів для топологічної структури ГБТ (рис. 6.3), отриманий у результаті розв'язку рівняння теплопровідності за заданої температури на електроді колектора відповідно згідно з підходами розрахунку процесів розігрівання з роботи [157], зображено на рис. 6.13.

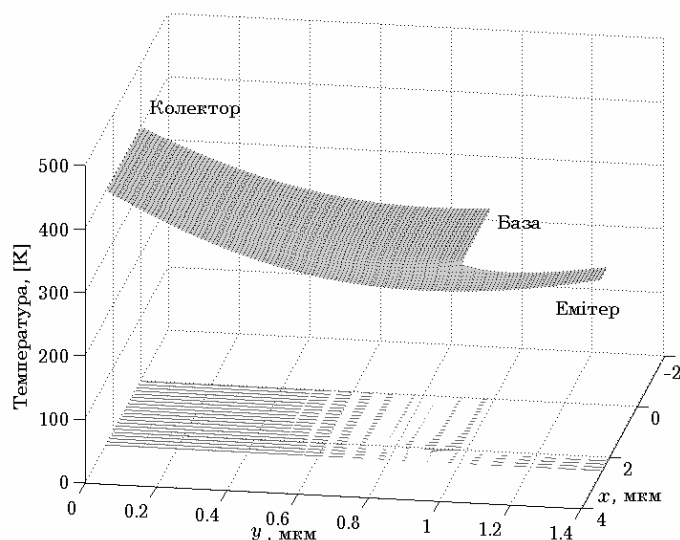


Рис. 6.13. Розподіл теплових полів у структурі ГБТ (у проекції на горизонтальній площині наведено поле градієнтів температури)

6.3.3. Схемотехнічне моделювання процесів саморозігрівання

Для схемотехнічного моделювання субмікронних напівпровідникових пристроїв, зокрема гетероструктурних біполярних транзисторів, надзвичайно важливо враховувати вплив ефектів саморозігрівання на електричні характеристики досліджуваних пристроїв. Подібні ефекти зумовлені зростанням температури напівпровідникового пристрою в результаті розсіяння потужності за досить високих значень робочих струмів, при цьому зростання напруженості електричного поля в активній області транзистора приводить до виникнення сильнопольових ефектів, пов'язаних з розігріванням носіїв. Дрейф і дифузія в сильному електричному полі, особливо в області переходів, може приводити до накопичення носіїв, зокрема за рахунок їх міждолинних переходів. Крім того, в області бази можуть посилюватися процеси генерації і рекомбінації. Інтегрально ці процеси можуть зумовлювати зміну робочої точки на ВАХ та процеси запізнювання струму під час імпульсної вхідної дії. Проблема опису ефектів саморозігрівання особливо актуальна для транзисторів, які працюють у режимі великого сигналу, якщо робоча точка еволюціонує в широкому діапазоні значень напруги живлення. У більшості математичних

моделей напівпровідникових компонентів, які входять до складу пакетів схемотехнічного моделювання, ці ефекти описуються формально [158–160].

З позицій схемотехнічного моделювання адаптація математичної моделі напівпровідникового пристрою для врахування ефектів саморозігрівання зводиться до знаходження відхилення між ізотепловим режимом і режимом саморозігрівання з наступним визначенням параметрів саморозігрівання залежно від знайденого теплового відхилення робочих струмів.

Для субмікронних гетеробіполярних транзисторів нелінійні відхилення початкових струмів, зумовлені саморозігріванням, і зміни струму колектора можна врахувати введенням додаткових складових у рівняння струмів базової або колекторної області, проте подібна компенсація не є цілком адекватною [161].

Більш адекватне врахування впливу ефекту саморозігрівання на електричні параметри субмікронних гетероструктурних транзисторів може бути пов'язане з визначенням залежностей параметрів пристрою від температури і відповідним доповненням математичних моделей отриманими залежностями [162].

Для моделювання розглянемо гетероструктурний біполярний транзистор, структуру якого зображено на рис. 6.14, з такими електрофізичними параметрами: товщина бази 0,14 мкм і рівень легування берилієм 10^{19} см^{-3} ; товщина колектора 0,7 мкм з кремнієвим легуванням $7,5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$; омічна металізація бази – сплав золота з берилієм, емітера і колектора – сплав золота з германієм; верхній шар емітера складається з високолегованого шару n^+ -GaAs і декількох шарів AlGaAs; база є тонким сильно легованим акцепторами шаром.

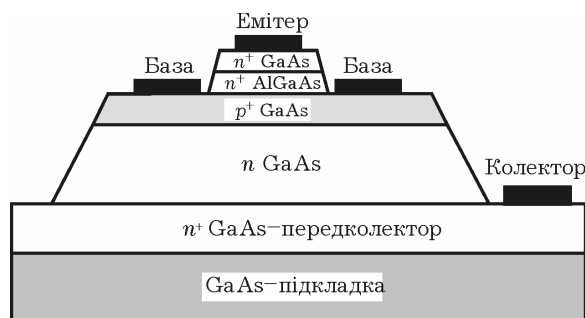


Рис. 6.14. Топологічна структура гетеробіполярного транзистора

Пропонований підхід полягає у схемотехнічному моделюванні й виборі значень баластних опорів у колекторній і базовій областях транзисторної структури, з чого, у свою чергу, можна визначити тип зворотного зв'язку, а також тип нелінійного залежного джерела. Саме це джерело відображає вплив ефекту саморозігрівання.

Введений у модель зворотний зв'язок може бути як позитивним, так і негативним. Позитивний виникає тоді, коли у схемі як залежне використовується джерело напруги, кероване напругою (рис. 6.15), у цьому разі зі збільшенням напруги «колектор–емітер» $V_{к.е}$ зростає струм колектора. Негативний зворотний зв'язок виникає у разі використання залежного джерела струму, керованого напругою, і тоді із збільшенням напруги V_k спадає струм колектора.

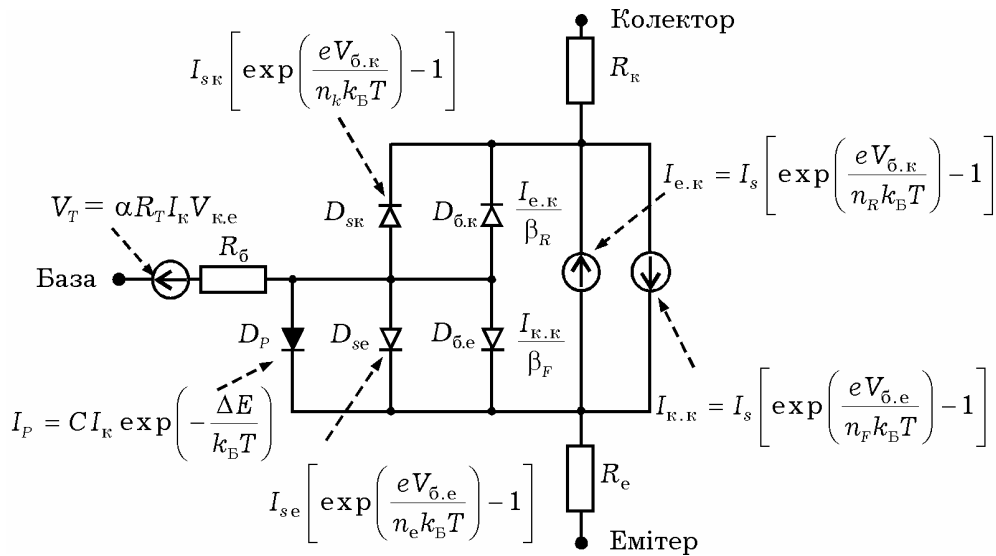


Рис. 6.15. Схемна модель гетероструктурного біполярного транзистора

Резистори R_k , R_b , R_e описують опори металізації, дві пари діодів $D_{б.е}$, $D_{се}$ та $D_{б.к}$, $D_{ск}$ описують нелінійні ефекти в ГБТ. Перша пара діодів $D_{б.е}$ та $D_{се}$ моделює зміну насичення струму зі зміною струму колектора, діод $D_{б.е}$ пов'язаний з моделюванням інжекції електронів до емітера, а діод $D_{се}$ моделює процеси рекомбінації у базі, утворення області накопичення просторового заряду і поверхневу рекомбінацію. Друга пара діодів $D_{б.к}$, $D_{ск}$ моделює залежність зворотного струму від напруги зміщення,

діод $D_{бк}$ моделює інжекцію електронів з колектора в базу або дірок з бази в колектор, діод $D_{ск}$ – рекомбінацію в базі, утворення області просторового заряду і поверхневу рекомбінацію при інверсному режимі роботи. Діод D_p моделює діркову складову струму колектора, а залежне джерело, кероване напругою V_T – позитивний зворотний зв'язок, температурна залежність якого описується рівнянням $V_T = \alpha R_{th} I_K V_K$, де α – коефіцієнт електротеплового зворотного зв'язку, В/К; R_T – тепловий опір, К/Вт; I_K – струм колектора, А; V_K – напруга на колекторі, В.

Струм бази в цій моделі описується двома парами паралельних діодів – для переходів «база–емітер» і «база–колектор» відповідно. Використання двох паралельних діодів для моделювання кожного переходу дозволяє розрахувати залежність підсилення струму від напруги зміщення. Перший діод кожного переходу відповідає струму рекомбінації в області просторового заряду за малої напруги зміщення. Ця складова струму пов'язана з прямозміщеним бар'єром, що має коефіцієнт неідеальності n , близький до двох. Другий діод описує складову струму переходу між емітером і колектором.

Струм колектора пов'язаний з коефіцієнтом неідеальності n у прямозміщеному переході. Оскільки струм колектора транзистора є результатом інжекції електронів у базу під час дифузії, то коефіцієнт неідеальності близький до одиниці.

Найбільш повно врахувати ефект саморозігрівання можна за комбінованого використання позитивного і негативного зворотного зв'язку [162; 163]. Це дозволяє запропонувати адаптований підхід до урахування ефекту саморозігрівання гетеробіполярної транзисторної структури.

Оскільки джерело струму, кероване напругою, може бути заміщене еквівалентним джерелом напруги, керованим напругою, то можна припустити, що, якби зі зміною опору навантаження зворотний зв'язок безперервно змінювався від негативного до позитивного, то за деякого оптимального значення

опору навантаження $R_{\text{опт}}$ глибина зворотного зв'язку зводиться до нуля – це означає, що ефект саморозігрівання врахований.

З погляду електричного кола зворотного зв'язку електро-тепловий зворотний зв'язок усередині ГБТ може бути кількісно описаний за допомогою коефіцієнта передачі зворотного зв'язку:

$$f = \frac{\partial I_{\text{к}}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial I_{\text{к}}} = \frac{\partial I_{\text{к}}}{\partial T} R_T V_{\text{к}}, \quad (6.11)$$

де P – розсіювана потужність, Вт; T – температура пристрою, К; R_T – опір теплового резистора.

Коефіцієнт зворотного зв'язку набуває додатних і від'ємних значень, які відповідають позитивному і негативному зворотному зв'язку. Теплова нестабільність настає за $f > 1$, ефект саморозігрівання може бути врахований, якщо f звести до нуля. Оскільки і R_T , і $V_{\text{к}}$ додатні, то з виразу (6.11) видно, що знак коефіцієнта зворотного зв'язку визначається співвідношенням $(\partial I_{\text{к}}/\partial T)$.

Якщо використовується джерело, кероване напругою, розміщене в базовій області, то струм колектора може бути записаний так:

$$I_{\text{к}} = I_{\text{s}} \exp \left\{ \frac{e}{k_{\text{Б}} T_0} [V_{\text{б.е}} - I_{\text{б}} V_{\text{б}} + \alpha (T - T_0)] \right\}, \quad (6.12)$$

де I_{s} – струм насичення, А; $I_{\text{б}}$ та $V_{\text{б.е}}$ – струм бази і напруга «база-емітер» відповідно; T_0 – зовнішня температура, К.

Зважаючи на значення діркової складової струму

$$I_{\text{р}} = C I_{\text{к}} \exp \left(-\frac{\Delta E}{k_{\text{Б}} T} \right), \quad (6.13)$$

струм бази можна виразити через струм колектора таким чином:

$$I_{\text{б}} = \frac{I_{\text{к}}}{\beta} + I_{\text{р}} = I_{\text{к}} \left[\frac{1}{\beta} + C \exp \left(-\frac{\Delta E}{k_{\text{Б}} T} \right) \right], \quad (6.14)$$

де ΔE – ефективна різниця у висоті потенціального бар'єру для дірок і для електронів, еВ; C – відношення струму електронів до струму дірок для $\Delta E = 0$; β – коефіцієнт посилення струму.

Підставляючи вираз (6.14) у рівнянні (6.12), отримуємо

$$V_{\bar{6}e} = \frac{k_B T_0}{e} \ln \frac{I_k}{I_s} + I_k R_{\bar{6}} \left[\frac{1}{\beta} + C \exp \left(-\frac{\Delta E}{k_B T} \right) \right] - \alpha (T - T_0), \quad (6.15)$$

а диференціюючи (6.15) відносно T і розв'язуючи відносно $\partial I_k / \partial T$, отримуємо:

$$\frac{\partial I_k}{\partial T} = \frac{\alpha - (\Delta E / k_B T^2) R_{\bar{6}} I_p}{(k_B T_0 / e) + I_{\bar{6}} R_{\bar{6}}} I_k. \quad (6.16)$$

Коефіцієнт передачі кола зворотного зв'язку набуває вигляду

$$f = \frac{\alpha - (\Delta E / k_B T^2) R_{\bar{6}} I_p}{(k_B T_0 / e) + I_{\bar{6}} R_{\bar{6}}} R_{th} I_k V_k, \quad (6.17)$$

де перша і друга частини чисельника описують позитивний і негативний зворотний зв'язок в ГБТ відповідно.

Прирівнюючи вираз (6.17) до нуля ($f = 0$) з урахуванням рівнянь (6.11) та (6.13), отримуємо:

$$R_T = \frac{\alpha T}{C I_k (\Delta E / k_B T)} \exp \left(\frac{\Delta E}{k_B T} \right) = \frac{\alpha T}{(\Delta E / k_B T) I_p}.$$

Якщо виконується нерівність $R_{\bar{6}} < R_T$, то це додатний зворотний зв'язок, якщо $R_{\bar{6}} > R_T$ – негативний, якщо $R_{\bar{6}} = R_T$ – зворотного зв'язку немає.

Коефіцієнт передачі зворотного зв'язку за наявності додаткових опорів в області бази і в області емітера матиме такий вигляд:

$$f = \frac{\alpha - (\Delta E / k_B T^2) (R_{\bar{6}} + R_e) I_p}{(k_B T_0 / e) + I_{\bar{6}} R_{\bar{6}} + I_e R_e} R_T I_k V_k.$$

У розрахунках використовувалися такі значення констант: $\alpha = 1,2$ мВ/К; $\Delta E = 0,28$ еВ; $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К; $T_0 = 300$ К; $R_T = 1300$ К/Вт; $I_k = 40$ мА; $V_k = 3$ В; $C = 5$; $\beta = 100$.

Схема однокаскадного підсилювача НВЧ (рис. 6.16) включає індуктивності $L_{\bar{6}} = 10$ нГн; $L_k = 10$ нГн; $L_e = 1,49$ нГн, які забезпечують узгодження вхідних і вихідних кіл підсилювача; $L_1 = 1,97$ нГн та $L_2 = 1$ нГн – фільтрувальні індуктивності в колах живлення; розділювальні ємності $C_1 = 1$ пФ і $C_2 = 1$ пФ

на вході та на виході підсилювача. Активним елементом каскаду є ГБТ, схему заміщення якого зображено на рис. 6.15.

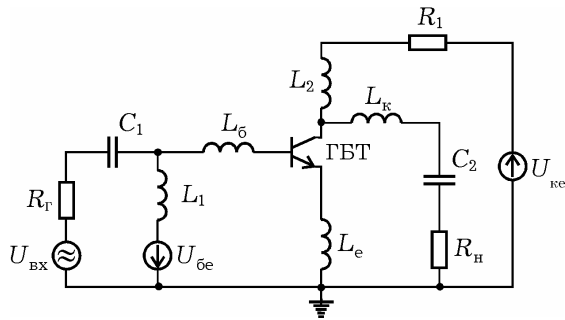


Рис. 6.16. Схема однокаскадного підсилювача на гетеробіполярному транзисторі

напругою, а збільшення опору R_e збільшує коефіцієнт підсилення напруги.

Сумісне використання наведеної методики і результатів двовимірного фізико-топологічного моделювання дозволяє отримати уточнені оцінки величини опорів бази, емітера і колектора у разі різної зміни температури і ступеня впливу ефекту саморозігрівання.

Розглянута методика моделювання процесів саморозігрівання в субмікронних гетеробіполярних структурах справедлива також для широкого спектра польових структур.

Отримані результати свідчать про особливості розподілу теплових полів у підзатворній області транзисторної структури, пов'язані з наявністю приповерхневого шару з підвищеною температурою, що збільшує ефект саморозігрівання в транзисторі як за рахунок додаткового розігрівання електронів у каналі, так і за рахунок їх розігрівання у витоковій і стоковій областях за межами активної області. При цьому підвищується температура носіїв, інжектованих з витоку в активну область, що підвищує ймовірність їх міждолинного розсіяння. В області стоку це приводить до затримки процесів релаксації енергії.

За результатами моделювання частотних характеристик, поданих на рис. 6.17, а і 6.17, б, можна зробити висновок, що збільшення товщини бази збільшує опір бази R_b і приводить до зсуву частоти підсилення з відповідною зміною коефіцієнта підсилення за

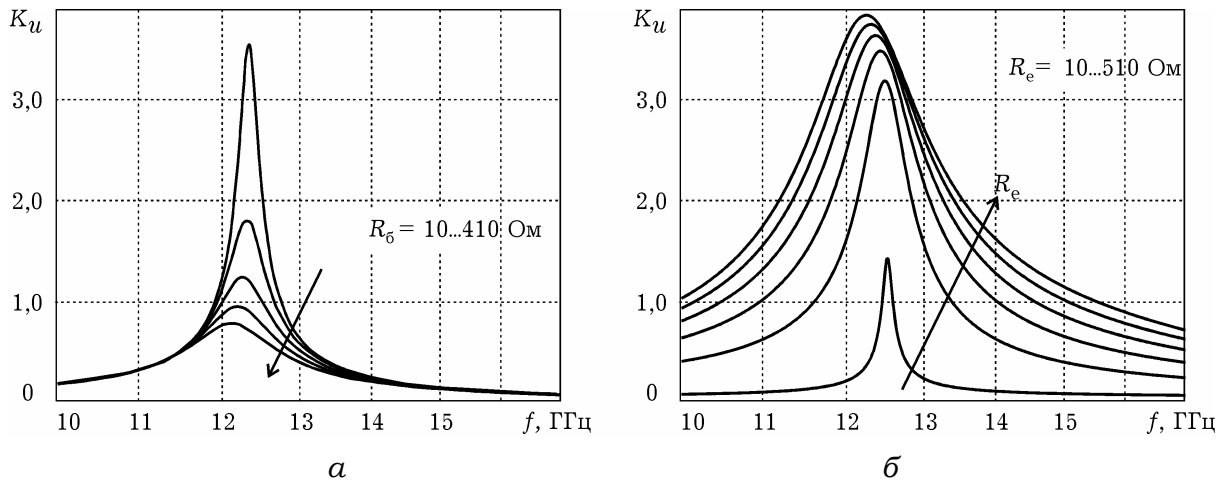


Рис. 6.17. Залежності коефіцієнта підсилення напруги від частоти за різних значень опору бази R_b та емітера R_e

Погіршення параметрів транзистора під впливом додаткового розігрівання (зменшення дрейфової швидкості й рухливості, зростання шуму) зумовлене як збільшенням паразитних опорів, так і розігріванням електронного газу в каналі, що приводить до зменшення рухливості електронів.

З наведених розрахунків і результатів моделювання видно, що для адекватного моделювання і врахування ефекту саморозігрівання важливим є не лише опис залежного джерела, яке впливає на нелінійні процеси в транзисторі, але й вибір значення баластного опору, який враховує в схемній моделі ГБТ вплив вказаних ефектів.

У режимах роботи транзистора, коли ефекти саморозігрівання помітніші, коефіцієнт підсилення зменшується у всьому діапазоні робочих частот. Слід чекати також збільшення коефіцієнта шуму ГБТ як унаслідок впливу ефекту саморозігрівання на фізичні процеси в області переходів, так і через наявність додаткових баластних елементів схемної моделі пасивних областей бази та емітера.

6.3.4. Електротепловий аналіз монолітних інтегральних схем на субмікронних транзисторах

Запропонований у п. 6.3.2 підхід може бути поширений для оцінювання теплового стану монолітних інтегральних мікросхем (МІС), включаючи результати досліджень розподілу теплового потоку для польового транзистора із затвором Шотткі й польового транзистора з гетероселективним легуванням [143; 144; 164; 165].

Грунтуючись на результатах електротеплового аналізу окремої структури транзистора, можна розрахувати теплові режими МІС і розподіл тепла в кристалі МІС. Для цього необхідно враховувати характеристики окремих транзисторних структур і топологію інтегральної схеми. Розбиття МІС на елементарні блоки, розрахунок розподілу тепла за методикою, наведеною в роботах [164; 166], і «зшивання» результатів дозволяють отримати повну картину розподілу тепла в кристалі МІС, що надалі може бути використано для вибору методу тепловідведення.

Зазвичай КВЧ МІС містять діоди, транзистори, резистори, ємності та інші компоненти, які можуть бути як джерелами тепла, так і розсіювальними елементами. Це ускладнює процес побудови теплової моделі та визначення розподілу температури в МІС.

Процедура розрахунку розподілу тепла в МІС складається з двох етапів. На першому етапі визначають тепловий опір активних елементів МІС, виходячи з даних про геометричні розміри і теплофізичні параметри елементів, за співвідношенням [163] $R_T = R_T^{\Gamma} (h_2 - h_1)(h - h_2)/h^2$, К/Вт, де h , h_1 , h_2 – висота кристала і зламів бічної поверхні теплового еквівалента відповідно, мкм; $R_T^{\Gamma} = h / (S\lambda)$ – геометричний еквівалент теплового опору, К/Вт; S – площа вертикального перерізу, м²; λ – коефіцієнт теплопровідності матеріалу, Вт/(м·К). Потім, використовуючи принцип електротеплової аналогії, знаходять

значення температури кожного елемента: $T_P = T_0 + \Delta t = T_0 - PR_T$, К, де T_0 – температура тепловідведення, К; P – розсіювана потужність, Вт.

На другому етапі проводиться фізико-топологічне моделювання МІС: розв'язують рівняння теплопровідності $-\nabla(\lambda \nabla T) = P + h(T_{ext} - T)$ зі змішаними граничними умовами Діріхле $hT = r$ і Неймана $\vec{n}(c \nabla T) + qT = g$, де h – коефіцієнт конвективного теплообміну із зовнішнім середовищем, Вт/(м²·К); r , c , q – функції, визначені на замкненій області; \vec{n} – нормаль до межі поділу двох середовищ.

Для моделювання був обраний широкосмуговий підсилювальний каскад на основі AlGaIn/GaN польових транзисторів з гетероселективним легуванням на кремнієвій підкладці [167].

Топологію досліджуваної структури зображено на рис. 6.18, а результати моделювання – на рис. 6.19.

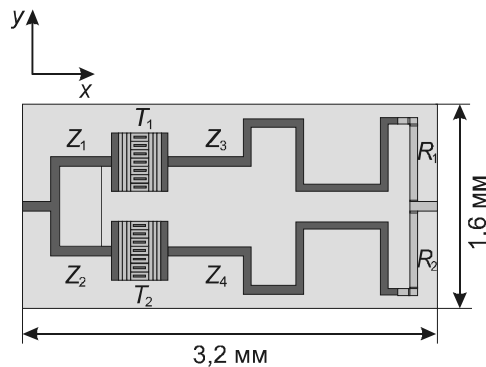


Рис. 6.18. Топологія широкосмугового підсилювача: T_1 , T_2 – транзисторні структури; Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_4 – лінії передачі; R_1 , R_2 – омичні контакти

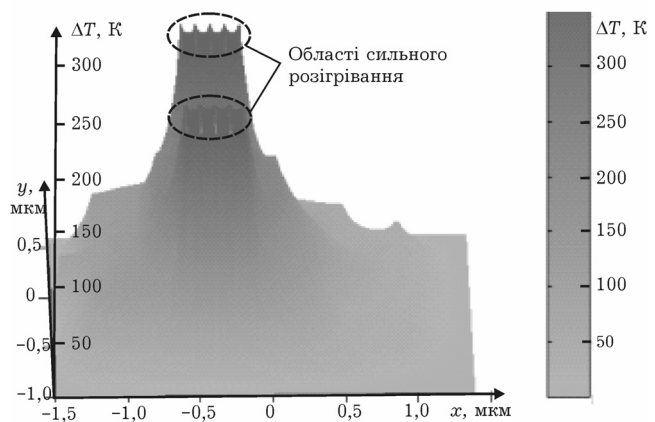


Рис. 6.19. Розподіл температурних полів у МІС

Отримані розподіли температур з екстремумом в області розміщення транзисторних структур свідчать про необхідність урахування високих градієнтів температур під час проектування і вибору топології. Спільне використання фізико-топологічних і теплових моделей дозволяє оптимізувати топологічну структуру МІС з погляду розсіюваної потужності та ефективного тепловідведення.

6.3.5. Шумові властивості субмікронних гетеробіполярних транзисторів

Поступаючись за мінімальним рівнем власних шумів субмікронним транзисторам з бар'єром Шотткі та гетероструктурним транзисторам, ГБТ, що мають граничні частоти підсилення понад 200 ГГц, незамінні в разі передачі високочастотних імпульсних сигналів, наприклад в оптоволоконних і бездротових каналах зв'язку міліметрового діапазону, які вимагають надширокої робочої смуги пропускання. У цьому разі актуальною стає задача моделювання шумових характеристик таких транзисторів [136; 166].

Під час моделювання мал шумних пристроїв зазвичай шукають оптимального співвідношення сигнал/шум. У субмікронних структурах в активній області транзистора переважають сильні поля, що приводить до ефекту «саморозігрівання» структури. Саморозігрівання є додатковою причиною підсилення нелінійних ефектів, що пов'язане більшою мірою з дрейфом і дифузією гарячих електронів і дірок, а також із наростанням процесів генерації-рекомбінації.

Особливістю ГБТ є наявність ділянки з від'ємною диференціальною провідністю на пологій ділянці ВАХ. У роботі [162] розглядається можливість «компенсації» ефекту саморозігрівання через введення деяких баластних резисторів (з опором у декілька сотень омів) в області бази і колектора. Однак це, як очікується, може приводити до зменшення крутизни і коефіцієнта підсилення. Крім того, можна чекати збільшення шуму омичних областей.

Для повноцінного аналізу й оптимізації шумових і підсилювальних характеристик транзистора необхідно використовувати методику розрахунку як внутрішніх локальних джерел шуму, так і сумарних джерел на вході та на виході транзистора, поданого чотириполісником. Використання хвильової шумової матриці τ , елементами якої є сумарна спектральна густина

потужності шуму на вході й на виході з урахуванням їх кореляційного зв'язку, дозволяє за відомої матриці розсіяння розрахувати мінімальний коефіцієнт шуму і супутній коефіцієнт підсилення потужності.

Шумова схемна модель ГБТ може бути в загальному випадку подана у вигляді шумових джерел внутрішньої частини транзистора і шумових джерел контактів, які традиційно описуються співвідношенням Найквіста: $\overline{U_n}^2 = 4k_B T_0 \Delta f R$.

Спектральна густина розраховується в припущенні перенесення електронів бази за рахунок процесів дифузії й не пов'язана з інжекцією через гетероперехід. Це припущення дійсне, поки механізми балістичного перенесення електронів не переважають, що, як правило, виконується для товщини бази понад 50 нм. Якщо інжекція через гетероперехід переважає, то спектральна густина потужності шуму істотно інша.

До особливостей опису шумових джерел ГБТ слід віднести наявність різнорідних фізичних процесів у двох переходах – гетеропереході та p – n -переході, а також процесів в області бази, яка в субмікронних транзисторах може становити кілька десятків нанометрів, і, як правило, не перевищує 200 нм.

Дробовий шум бази в біполярному транзисторі описується співвідношенням [168], справедливим на низьких частотах для гетеробіполярних транзисторів: $\overline{i_{ш.б}}^2 = 2eI_b C_{б.б} \Delta f$. Подібне співвідношення справедливе для колектора: $\overline{i_{ш.к}}^2 = 2eI_k C_{к.к} \Delta f$. Коефіцієнти $C_{б.б}$ і $C_{к.к}$ на низьких частотах близькі до одиниці. На високих частотах шум за рахунок протікання струму колектора фактично непомітний, тоді як шумовий дробовий струм бази стає помітним у діапазоні частот 1...40 ГГц й істотно зростає на частотах понад 40 ГГц. Це може бути пов'язано з тим, що на низьких частотах електрони інжектуються з емітера в базу, де вони збираються колектором і рекомбінують. Частина флюктуючих електронів на високих частотах повертається на емітер до того, як вони рекомбінують або потрапляють на колектор.

Ці електрони, що повертаються, приводять до підвищення струму бази, але майже не змінюють шумовий струм колектора. Як буде показано, частотна залежність базового шумового струму пов'язана також з кореляцією між базовим і колекторним шумовими джерелами.

Зазначимо, що в загальному випадку треба враховувати також флікер-шум ($1/f$): $\overline{i_{ш.б.f}}^2 = \kappa_F R_{бб} I_б^2 / f$, і вибуховий шум (шум, що має спектр Лоренца): $\overline{i_{ш.б.в}}^2 = \kappa_в R_{б.е}^2 I_б^2 \tau / [1 + (\omega\tau)^2]$, де κ_F – лоренців коефіцієнт, пропорційний швидкості рекомбінації у приконтактному шарі бази та залежний від часу життя τ вільних носіїв на пастках (центрах захоплення): $\tau = (\tau_0/T^2)\exp(E_a/k_B T)$, де τ_0 – константа; E_a – енергія активації пасткових станів. При цьому час життя τ і лоренців спектр сильно залежать від температури кристалічної ґратки.

Вважають, що флікер-шум домінує на низьких частотах, вибуховий шум – на середніх, а дробовий – на високих. Аналізуючи шум на НВЧ, флікер-шумом можна нехтувати. Нині немає єдиного фізичного механізму вибухового шуму за прямих і зворотних зміщень p - n -переходу, проте деякі експериментальні дані свідчать про випадкові процеси у приповерхневому шарі каналу. При цьому енергія активації за зворотних зміщень переходу оцінюється як близька до 0,8 еВ. Враховуючи сучасну конструкцію ГБТ, коли вільна межа між контактами зведена до мінімуму, а також типову тривалість імпульсу вибухового шуму, яка становить більше 100 нс, можна передбачити, що ця складова шуму в діапазоні НВЧ фактично не виявляється. Проте захоплення носіїв пастками і зміна внаслідок цього енергетичних зон у приповерхневому шарі може зумовити додаткове розігрівання носіїв в області каналу через його звуження, може змінювати опір міжконтактних областей і приводити до збільшення теплового шуму пасивних областей транзистора.

Однією з найбільш істотних складових шуму в ГБТ є дробовий шум, співвідношення для якого в області бази і колектора з урахуванням наведених міркувань запишемо, відповідно, для бази [169]:

$$\begin{aligned} \overline{i_{ш.б}}^2 = & 2eI_e \Delta f \left| \frac{C_e}{C_{e0}} \right|^2 - 2eI_k \Delta f \left| \frac{C_k}{C_{k0}} \frac{n_e}{n_k} \right| - \\ & - 2eI_e \Delta f \left| \frac{C_e}{C_{e0}} - 1 \right|^2 + 2eI_k \Delta f \left| \frac{C_k}{C_{k0}} \frac{n_e}{n_k} e^{-j\omega\tau_k} - 1 \right|^2, \end{aligned}$$

де τ_k – час запізнювання фази струму колектора, $\tau_k = x_k/(2v_H)$; x_k – товщина колектора; v_H – швидкість насичення носіїв, і для колектора $\overline{i_{ш.к}}^2 = 2eI_k \Delta f$, а $n_e = \beta n_k + n_0/(1 + \beta)$, де β – передавальний коефіцієнт струму. Коефіцієнти C_e й C_k знаходять за формулами $C_e = \gamma x_0 / \text{th}(\gamma x_0)$ та $C_k = \gamma x_0 / \text{sh}(\gamma x_0)$, при цьому на постійному струмі ($\omega = 0$) ці коефіцієнти набувають значення відповідно C_{e0} й C_{k0} . Сталу поширення в базі визначають як

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{D_n \tau_n}} \sqrt{1 + j\omega\tau_n},$$

де D_n – коефіцієнт дифузії; τ_n – час життя електронів у базі. «Дифузійний» механізм опису шуму в базі справедливий, коли довжина вільного пробігу носіїв у базі менша від товщини бази. Зі зменшенням товщини бази й за можливого балістичного руху гарячих носіїв змінюються механізми протікання струму і посилюється високочастотна складова шуму. Шумові струми бази й колектора мають кореляційний зв'язок, який описується співвідношенням

$$\overline{i_{ш.б}^* i_{ш.к}} = 2eI_k \left(\frac{C_k n_e}{C_{k0} n_k} e^{-j\omega\tau_k} - 1 \right).$$

У разі сильного розігрівання носіїв потрібно враховувати залежність рухливості електронів і дірок від напруженості електричного поля, які визначаються в наближенні часу релаксації носіїв.

У такій шумовій моделі можливе використання деяких усереднених значень коефіцієнта дифузії, визначених для середніх значень електричного поля залежно від положення робочої точки на ВАХ.

Отримання мінімального коефіцієнта шуму ГБТ пов'язане із забезпеченням деяких необхідних чинників. До таких чинників слід віднести оптимальний вибір конструкції і топології транзистора, його електричного режиму, а також забезпечення оптимального режиму узгодження.

Аналізовану шумову модель ГБТ зображено на рис. 6.20. Перехід «база–емітер» моделюють RC -з'єднанням $R_{д.е}$ і $C_{д.е}$, яке описує параметри модельного діода «база–емітер», а також відповідними шумовими джерелами. При цьому ємність – це сума дифузійної ємності та ємності прямозміщеного переходу. Напруга «база–емітер» керує струмом колектора, який моделюється джерелом струму, керованим напругою, з керувальним параметром $g_m = g_{m0} \exp(j\omega\tau_k)$. Параметри другого діода задані RC -з'єднанням $R_{д.к}$ і $C_{д.к}$. Активна область транзистора моделюється також вихідним опором R_0 і шумовим джерелом $i_{ш.к}$.

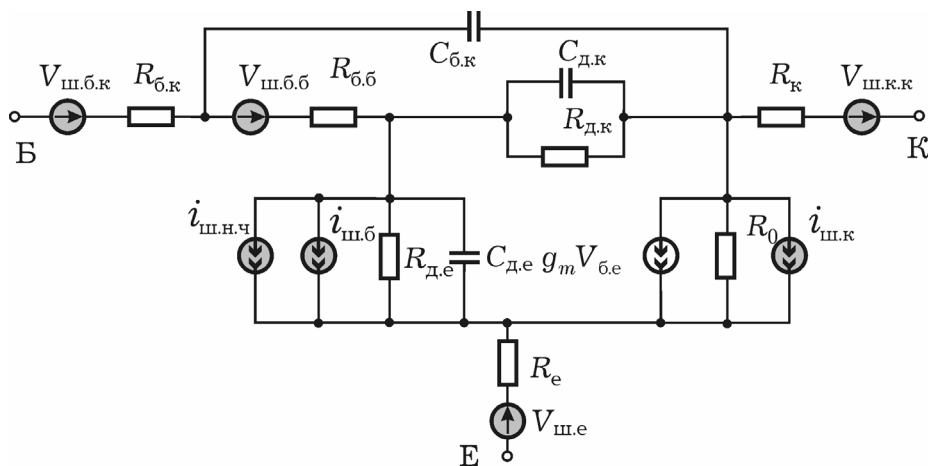


Рис. 6.20. Шумова схемна модель гетеробіполярного транзистора

У роботі [162] проаналізовано шумові характеристики типових структур $Al_xGa_{1-x}As$ ГБТ для різних конструкцій емітера, що включають від 1 до 5 секцій. Показано, що зі збільшенням рівня струму бази мінімальний коефіцієнт шуму

зростає у всьому діапазоні частот, при цьому частотна залежність коефіцієнта шуму тим істотніша, чим більший струм бази. Спрощену шумову модель транзистора показано в роботі [162]. Розрахований мінімальний коефіцієнт шуму для діапазону частот 1...20 ГГц, що змінюється від 2 до 3 дБ для транзистора з розмірами емітера $2 \times 20 \text{ мкм}^2$, передатним коефіцієнтом струму $\beta = 50$, часом запізнювання 3,5 пс і значенням опорів контактів, що змінюються, від 2 до 14 Ом за струму колектора 15 мА. За схемною моделлю (рис. 6.20), що описує подібну структуру і доповнена узгоджувальними зовнішніми індуктивними компонентами для набуття мінімального значення коефіцієнта шуму, відповідно до розглянутого в дод. Д5 алгоритму розраховано частотні підсилювальні й шумові характеристики.

Одним зі способів уточнення моделі є більш строге врахування ефектів саморозігрівання і балістичних ефектів за малих значень товщини бази (менше 100 нм).

6.4. ПОТУЖНІ МОП-ТРАНЗИСТОРИ

Останніми роками серед потужних кремнієвих НВЧ-транзисторів лідирують МОП-транзистори, виготовлені за технологією *LDMOS* (*Laterally Diffused Metal Oxide Semiconductors*) на основі кремнію. Перевагами кремнієвих приладів є насамперед низька вартість пластин, відпрацьованість технології та відносна простота інтеграції аналогових і цифрових схем на одному кристалі [170]. Завдяки мінімізації розмірів частотні характеристики кремнієвих транзисторів підвищилися настільки, що, незважаючи на більш низьку рухливість електронів, вони успішно конкурують з гетеробіполярними в діапазонах до 3 ГГц. Ще 2000 р. [171] компанія *Motorola* представила *LDMOS*-транзистор з довжиною затвора 0,6 мкм, товщиною підзатворного оксиду 40 нм і пробивною напругою «витік–підкладка» 65 В. За сумарної ширини затвора 480 мм транзистор працював у двотактному режимі з вихідною потужністю 220 Вт за робочої напруги 28 В з ККД 46 % на частоті 2,12 ГГц.

Принципова відмінність *LDMOS*-технології від традиційної МОП-технології – несиметрична структура транзистора. На p^+ -підкладці (рис. 6.21) вирощується порівняно слабо легований епітаксіальний p -шар, призначення якого – зменшити вихідну ємність «стік–витік» і збільшити пробивну напругу. З боку витіку формується сильнолегована p^+ -область, яка з'єднує витік з підкладкою. Під високолегованою n^+ -областю витіку формують додаткову тонку p -область, під областю стоку – n -область. Перша визначає порогову напругу і параметри відсічення каналу, друга дозволяє збільшити напругу пробою і запобігає інжекції гарячих електронів у підзатворний оксид. Характерною особливістю *LDMOS*-транзисторів є шар металізації, сполучений з витокком і нависаючий над затвором. Цей шар є екраном, що зменшує паразитну прохідну ємність C_{gd} негативного зворотного зв'язку. Крім того, екран істотно змінює розподіл поля між стоком і затвором, ослабляючи напруженість поля біля стокового краю затвора і, відповідно, збільшуючи пробивну напругу стоку.

Особливість такої конструкції транзистора полягає в тому, що за відсутності зміщення на затворі поверхневий шар, що є планарною n^+pn^+ -структурою, не є провідним, і транзистор закритий. Для відкривання на затвор необхідно подати деяку додатну напругу в кілька вольтів, при цьому біля поверхні p -області під затвором утворюється інверсійний шар, що є провідним каналом з переважальною електронною провідністю.

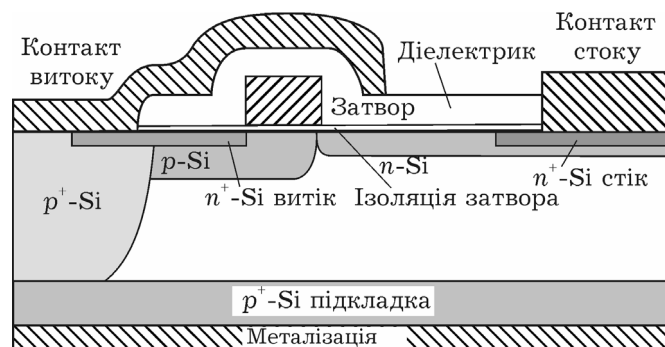


Рис. 6.21. Структура *LDMOS*-транзистора

Приклад стокових характеристик транзистора фірми *Philips Semiconductor* BLA1011-10 подано на рис. 6.22 [6.42].

Загалом ці характеристики мають типовий для МОП-транзисторів вигляд, проте за субмікронних довжин затвора у режимі насичення спостерігається істотне збільшення струму стоку. Це може бути пов'язане з тим, що зі збільшенням стокової напруги зростає потенціал каналу і в його стоковій частині збільшується ступінь інверсії.

У результаті збільшується товщина провідного каналу і його провідність. Одночасно з цим напруженість прискорювального електричного поля може зменшуватися, що послаблює ступінь насичення дрейфової швидкості електронів, характерну для сильного поля.

Транзистор має такі основні параметри: граничні значення вихідної напруги «стік–витік» – 75 В, напруга «затвор–витік» (± 15) В, максимальний вихідний струм 2,2 А. Суттєвою особливістю такого транзистора є досить високий внутрішній вбудований потенціал (близько 4 В), а також високі значення крутизни в робочому полі вихідних ВАХ.

Розробкою моделей *LDMOS*-транзисторів займаються не стільки вчені, скільки самі компанії-виробники і розробники САПР. Можна виділити дві різні моделі потужних *LDMOS*, широко використовуваних на практиці [173; 174]. Усі ці моделі є схемотехнічними і можуть бути описані за допомогою еквівалентних схем.

Компанія *STMicroelectronics* (<http://www.st.com>) розробила схемотехнічну однойменну модель, що описується електричним колом із зосередженими параметрами (рис. 6.23, а), має типовий для польових транзисторів вигляд і включає такі групи компонентів: паразитні елементи, пов'язані з пристроєм; нелінійний генератор струму; опір польового транзистора з керувальним *p–n*-переходом; діод, що моделює вплив підкладки.

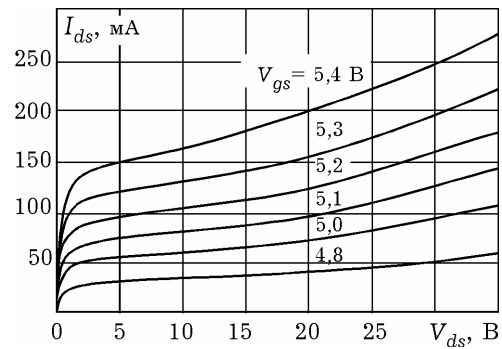


Рис. 6.22. Експериментальні вихідні вольт-амперні характеристики МОП (*LDMOS*) транзистора BLA1011-10

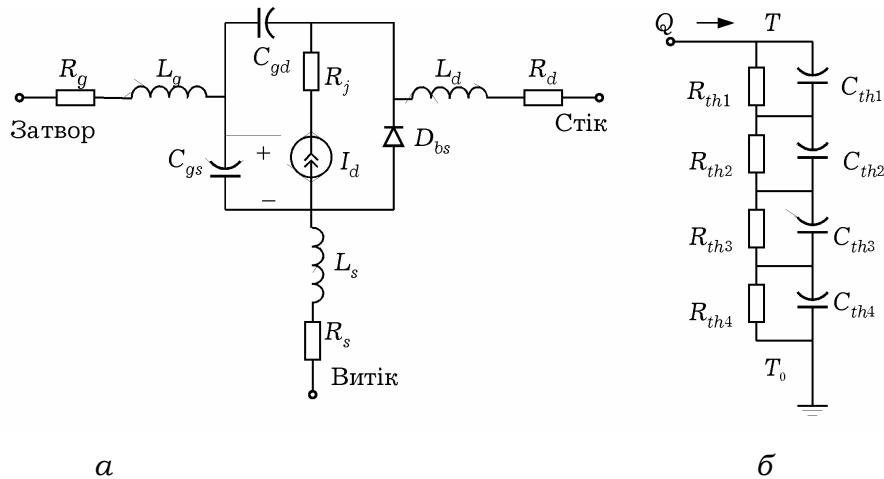


Рис. 6.23. Схемна модель LDMOS-транзистора [173]

Нелінійне джерело струму, кероване напругою, – найбільш важливий елемент для розрахунку статичних і динамічних характеристик пристрою. Керувальними є напруги V_{gs} і V_{ds} . Крім того, для обчислення статичного струму потрібно також визначити робочий діапазон польового транзистора. Для визначення рівнянь, що описують нелінійне джерело струму, кероване напругою, слід врахувати 15 параметрів, таких, як, наприклад, порогова напруга, наведене стоком зниження бар'єра, крутизна характеристики прямої передачі, нахил підпорогового струму, довжина каналу, коефіцієнт вихідної провідності, коефіцієнт теплової провідності, тепловий коефіцієнт порогової напруги та деякі інші, які ідентифікуються з експериментальних характеристик.

Програма компанії *STMicroelectronics* з однойменною назвою дозволяє моделювати статичні характеристики, описувати транзистор за допомогою S -параметрів за малого сигналу, розраховувати параметри схемної моделі приладу за великого сигналу. Особливості моделі – можливість моделювання паразитних елементів корпусу, а також наявність теплових елементів в еквівалентному колі, що враховують ефекти саморозігрівання.

Область квазінасичення моделюється нелінійним опором R_j , який може бути знайдений з вихідних статичних характеристик у лінійній області зміни струму за високої напруги.

Для моделювання впливу підкладки й опису режиму пробою, витоку струму стоку та ємності між витіком і стоком

у модельне коло введено діод. Статичні й динамічні характеристики такого діода описують звичайним способом, моделюється також їх залежність від температури.

Для врахування ефекту саморозігрівання вводиться тепловий електрод (рис. 6.23, б). Напруга між зовнішнім тепловим електродом і стоком визначає температуру, як описано в роботі [175].

Для моделювання паразитного впливу корпусу проводиться його електромагнітне моделювання, діапазон частот при цьому становить від 1 МГц до 3 ГГц. Результати моделювання подаються через S -параметри. З рис. 6.24 та 6.25 видно, що змодельовані вхідні й вихідні статичні характеристики транзистора і динамічні характеристики в режимі малого сигналу (S -параметри) добре відповідають експериментальним даним.

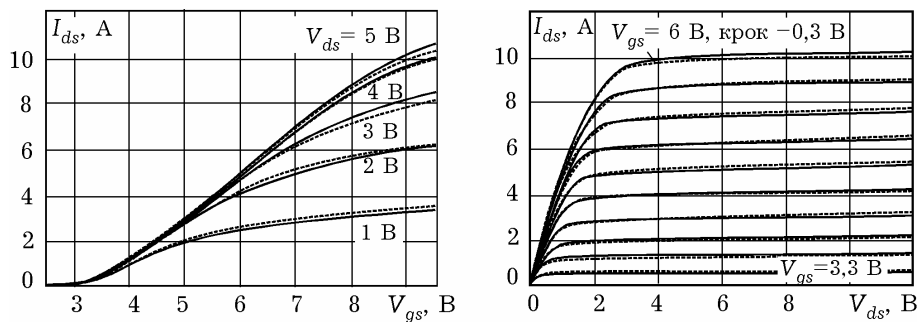


Рис. 6.24. Виміряні (суцільні лінії) і змодельовані (штрихові лінії) вхідні й вихідні статичні характеристики

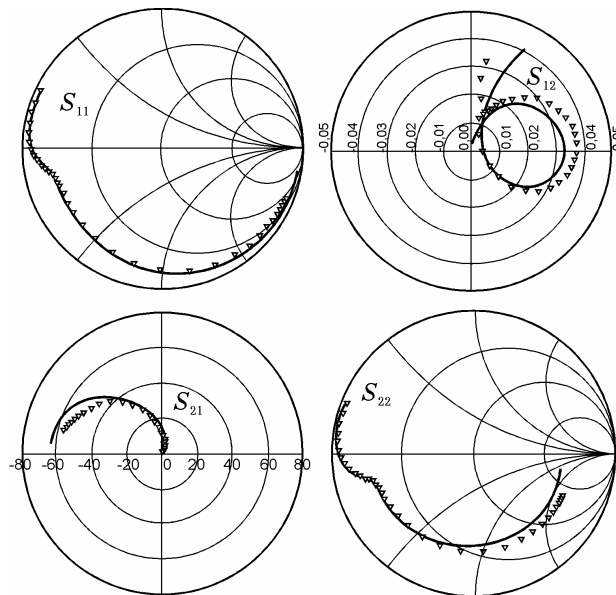


Рис. 6.25. Виміряні й змодельовані S -параметри для частот від 1 МГц до 3 ГГц: $V_{ds} = 7,2$ В; $I_{dq} = 100$ мА

Модель CMC (*Curtice/Modelics/Cree*) [174] розроблена групою компаній *W.R. Curtice Consulting* (<http://www.curtice.org>), *Modelithics Inc.* (<http://www.modelithics.com>) і *Cree Microwave* (<http://www.cree.com/>) для інтеграції в САПР *Agilent EEsof EDA Design & Simulation Software* компанії *Agilent Technologies* (<http://www.agilent.com>).

Модель має такі можливості: моделювання статичних характеристик, динамічних параметрів у режимі малого сигналу, врахування нелінійних ефектів, аналіз у часовій області. З особливостей моделі – хороше передбачення інтермодуляційних спотворень, адекватне моделювання в підпороговому режимі, моделювання динаміки процесів саморозігрівання, проста процедура отримання параметрів моделі. Модель, розроблена для базового вічка, тобто транзистора потужністю 1 Вт, може бути застосована до інших *LDMOS* через спеціально розроблену процедуру масштабування.

Порівняно з біполярними транзисторами *LDMOS* мають кращі характеристики за лінійністю, посиленням, тепловими режимами, стійкістю до розузгодження, мають вищий ККД, запас із розсіюваної потужності, надійність [176]. За цією технологією нині випускають більшість потужних високочастотних транзисторів.

Оскільки розмір структури «стік–витік» вічка *LDMOS*-транзистора більший за аналогічний розмір структури «база–емітер», то температура активної області не перевищує 200 °С навіть за вищої, ніж для біполярного транзистора, густини потужності (0,5 Вт/мм). Ще однією перевагою *LDMOS*-технології є з'єднання витoku з підкладкою – це забезпечує, по-перше, низьке значення індуктивності витoku, що у поєднанні з малою ємністю зворотного зв'язку надає *LDMOS*-транзисторам кращих підсилювальних характеристик порівняно з біполярними аналогами, а по-друге, таке включення дозволяє створити в транзисторі кращі умови для відведення тепла. У біполярному ж транзисторі найбільший об'єм кремнію займає область

колектора, яка має бути електрично ізольована від землі (радіатора), що утруднює відведення тепла.

Ще одна особливість польових структур взагалі й *LDMOS*-транзисторів зокрема пов'язана з меншою нелінійністю характеристик, ніж для біполярних приладів (рис. 6.25). Це приводить до того, що підсилення біполярного транзистора сильно змінюється залежно від потужності вхідного сигналу. Очевидно, що використання подібного транзистора негативно позначиться на якості всього підсилювача.

Нині наймасштабніша сфера застосування *LDMOS*-приладів – підсилювачі базових станцій стільникового зв'язку. Як різновид кремнієвої технології *LDMOS* має величезну перевагу – набагато нижчу порівняно з рештою матеріалів собівартість. За це ринок «прощає» *LDMOS*-приладам низьку густину потужності й проблеми з лінійністю характеристик.

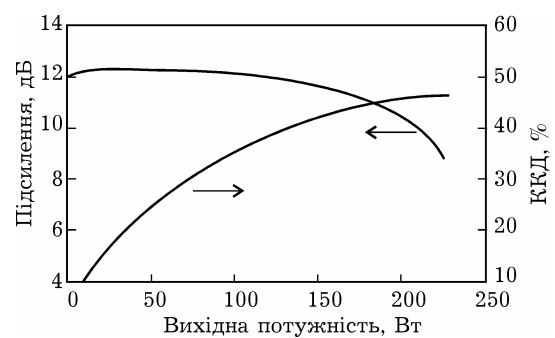


Рис. 6.26. Потужнісна залежність ККД і підсилення 220-ватного транзистора компанії *Motorola* [171]

Передавачі великої потужності використовують як у портативних мобільних, так і в стаціонарних системах стільникового зв'язку, при цьому потужність стаціонарних станцій, що забезпечують з'єднання «мобільників» з дротяними лініями зв'язку, сягає 600 Вт. Основні прилади, що забезпечують високу потужність у діапазоні 900 і 1900 МГц, – кремнієві *LDMOS*-транзистори, на частку яких припадає 90 % ринку потужних приладів НВЧ. Це пояснюється найнижчою для транзисторів цього класу густиною потужності (0,7 Вт/мм), найбільшими розмірами кристала і найнижчою вартістю.

Перспективна сфера застосування *LDMOS*-транзисторів – системи зв'язку стандарту WiMAX, одного з найперспективніших стандартів зв'язку, для якого необхідна висока лінійність і ККД транзисторів.

Успіхи у вдосконаленні *LDMOS*-технології не перешкоджають подальшому розвитку GaAs потужних НВЧ-транзисторів. У базових станціях, де вихідна потужність залежить від трафіку, підсилювачі потужності на *LDMOS*-транзисторах не завжди можуть працювати з якнайкращою ефективністю. Для таких систем краще підходять GaAs-транзистори, що мають порівняно з кремнієвими ширший динамічний діапазон. Проте фірма *Freescale Semiconductor*, яка випустила достойний *LDMOS*-конкурент GaAs *pHEMT* на частоту 3,5 ГГц, розробила арсенідгалієві транзистори на частоту 6 ГГц з вихідною потужністю 100 Вт, що відповідають усім вимогам до WiMAX-систем. Компанія *Toshiba America Electronic Components (TAEC)* створила GaAs гетероперехідні польові транзистори (*HFET*) з діапазоном 13,75...14,5 ГГц для підсилювачів потужності наземних базових станцій супутникових систем зв'язку.

Проте найбільш перспективними потужними НВЧ-приладами натеper можна вважати GaN-транзистори, які характеризуються, порівняно з транзисторами на інших напівпровідникових матеріалах, більш високою густиною струму насичення, великою напругою пробою і великою густиною потужності в перерахунку на одиницю ширини затвора (рис. 6.27).

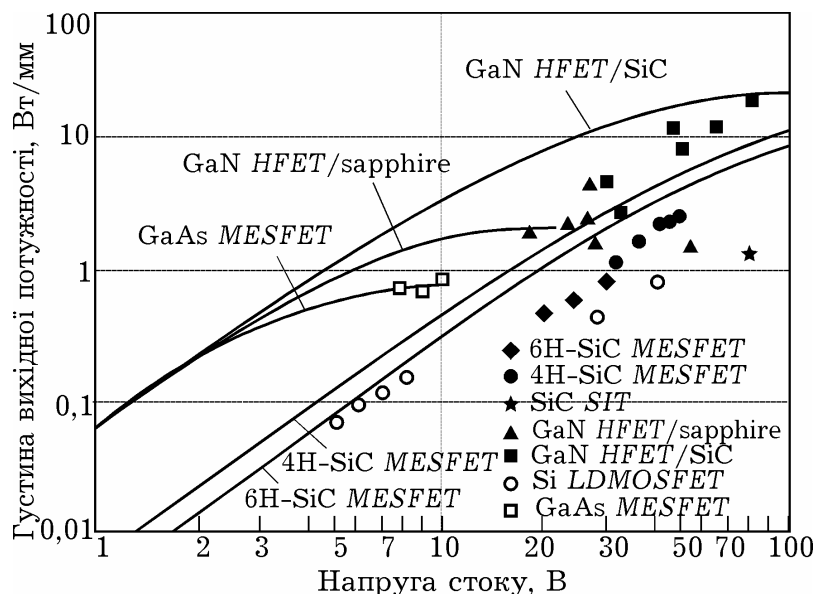


Рис. 6.27. Залежність вихідної потужності на 1 мм ширини затвора від стоквої напруги для різних матеріалів і структур транзисторів [177]

До технології нітриду галію звертаються дедалі більше напівпровідникових компаній: за період з 2000 по 2005 р. кількість компаній і дослідницьких центрів, зайнятих розробкою приладів і вивченням нітриду галію, збільшилося з 500 до 2000. Продажі GaN-приладів (не лише транзисторів, але й світлодіодів) з 3,5...3,6 млрд дол. у 2006 р. зросли до 7,2 млрд дол. у 2009 р. [178].

На ринку потужних транзисторів провідне положення, порівняно з GaAs *pHEMT* і польовими транзисторами із затвором Шотткі (*MESFET*), займають GaAs біполярні гетеротранзистори (*HBT*) і *LDMOS*-транзистори. Але надалі їх, імовірно, витіснять SiC і GaN-прилади [179].

Рекомендована література: [5]; [29]; [134]; [135]; [136]; [137]; [138]; [139]; [140]; [141]; [142]; [143]; [144]; [145]; [146]; [147]; [148]; [149]; [150]; [151]; [152]; [153]; [154]; [155]; [156]; [157]; [158]; [159]; [160]; [161]; [162]; [163]; [164]; [165]; [166]; [167]; [168]; [169]; [170]; [171]; [172]; [173]; [174]; [175]; [176]; [177]; [178]; [179].

7. РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИЙ ДІОД

7.1. ОСНОВНІ УЯВЛЕННЯ

7.1.1. Структурні складові резонансно-тунельного діода

Резонансно-тунельний діод є однією з найпростіших структур з поперечним транспортом. Розглянемо топологію РТД, гетероструктури якого виготовлено з $\text{Al}_{0.33}\text{GaAs}_{0.77}/\text{GaAs}$ (рис. 7.1, а).

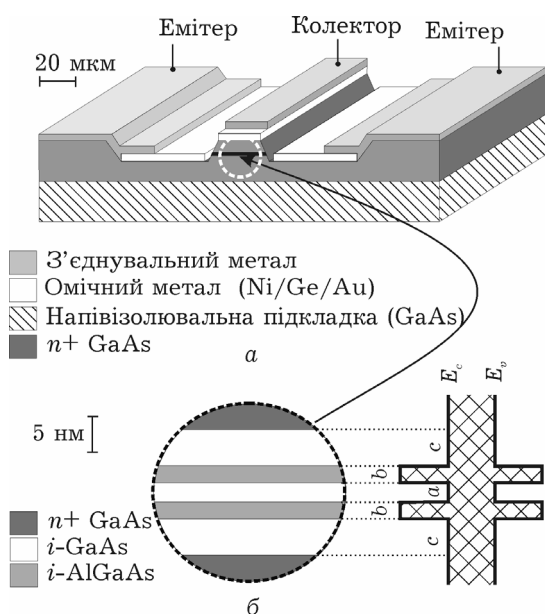


Рис. 7.1. Структура РТД (а), активної області та зонна діаграма (б)

область, що міститься поміж ними. Релевантна частина макроскопічної області досить сильно легується домішками n -типу (зазвичай не менше за 10^{23} м^{-3}), тоді як мікроскопічну область лишають чистою від домішок. Ці області мають усталені назви:

резервуари – це високолеговані області, що прилягають до емітерного та колекторного електродів (рис. 7.1);

квантова (активна) область – нелегована область між двома резервуарами, частина якої показана у збільшеному масштабі на рис. 7.1, б.

Такий поділ дає змогу створювати «комбіновані» моделі [180], під час побудови яких для різних ділянок одного пристрою використовуються різні способи опису електронного колективу:

У площині гетеромереж його розміри мають значення від одиниць до кількох десятків мікрометрів, що значно перевищує період ґратки (який для GaAs становить близько 0,56 нм), а також довжину хвилі де Бройля λ_F , довжину релаксації фази L_F і довжину вільного пробігу L_p .

У структурі РТД можна виділити три підсистеми (рис. 7.1, а): макроскопічні області, що прилягають до контактних площадок, а також мікроскопічну

для резервуарів – напівкласичний, а для квантової області – різноманітні квантово-механічні формалізми, зокрема *метод хвильових функцій*. Створення комбінованих моделей є альтернативою опису в межах єдиного квантово-механічного формалізму усього пристрою, наслідком чого є невиправдано висока інтенсивність використання математичних та чисельних ресурсів без суттєвого підвищення точності моделі.

Зауважимо, що відомі у наш час пристрої наноелектроніки, зокрема нанотрубки, одноелектронні транзистори та інші перспективні компоненти, неодмінно містять класичні області. Будь-який компонент чи система наноелектроніки мусить містити «класичну» область [22], яка необхідна для проведення вимірювання [181].

7.1.2. Принцип роботи резонансно-тунельного діода

Характерною властивістю РТД є наявність на ВАХ ділянки *від'ємної диференціальної провідності* (ВДП), яка має квантову природу та зумовлює особливості його використання. Резонансно-тунельний діод був уперше запропонований радянським вченим Л. Йогансеном у 1963 р. [182; 183] як аналог резонатора Фабрі–Перро для електронних хвиль (хвиль де Бройля). У 1974 р. Л. Т. Чанг вперше на практиці спостерігав ділянку ВДП за температури, близької до абсолютного нуля [184]. Її наявність недвозначно вказувала на реалізацію у створеному зразку резонансного тунелювання. Подальшому розвитку РТД сприяло вдосконалення технологій молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ) і хімічного осадження з газової фази металоорганічних сполук, що дозволило Т. Шевчуку [185] вже в 1985 р. спостерігати ділянку ВДП у РТД за кімнатної температури.

Принцип роботи РТД легко зрозуміти з пояснень *S. Luryi* [186]. За низької температури в сильно легованих резервуарах електрони займають стани з енергією від дна зони провідності E_c до енергії Фермі E_F : $E_c < E < E_F$ (рис. 7.2). Усі можливі

комбінації хвильових чисел, таким чином, містяться у сфері радіуса $k_\Phi = \sqrt{2m^* E_\Phi} / \hbar$ (рис. 7.2, а).

У резервуарах електронний газ тривимірний, відповідний закон дисперсії має вигляд

$$E_{3D} = E_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}, \quad (7.1)$$

де E_c – дно зони провідності; $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$; $k_{\parallel(z)}$ – «поздовжнє» («поперечне») хвильове число електрона, якому відповідає «поздовжня» («поперечна») енергія, $E_{\parallel(z)} = \hbar^2 k_{\parallel(z)}^2 / 2m^*$.

У квантовій ямі поперечна енергія електрона E_z квантується та може набувати дискретних значень E_i . Закон дисперсії (7.1) для електронів модифікується, оскільки електронний газ стає двовимірним:

$$E_{2D} = E_i + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}. \quad (7.2)$$

Надалі вважатимемо, що в ямі є лише один рівень енергії: $E_z = E_0$. За законом збереження енергії під час тунелювання електрона з тривимірного електронного газу в емітері до двовимірного у квантовій ямі мусить бути

$$E_{2D} = E_{3D}, \quad (7.3)$$

де E_{2D} та E_{3D} визначаються з формул (7.1) та (7.2) відповідно.

З рівності (7.3) та з урахуванням збереження хвильового числа k_{\parallel} отримаємо умову, що накладається на поперечне хвильове число електронів, які тунелюють з емітера:

$$k_z = \sqrt{\frac{2m^*(E_0 - E_c)}{\hbar^2}} \equiv k_0. \quad (7.4)$$

Співвідношення (7.4) є умовою резонансного тунелювання. Кількість електронів у емітері, для яких вона виконується, залежить від положення рівня енергії у квантовій ямі (рис. 7.2, б). Так, якщо $k_0 > k_\Phi$, жоден електрон не задовольняє умову (7.4), відповідно і струм через двобар'єрну квантову систему (ДБКС) не проходить. Починаючи з $k_0 = k_\Phi$ і до $k_0 = 0$ кількість елек-

тронів, що здатні тунелювати, збільшується і досягає максимуму за $k_0 = 0$, при цьому струм зростає за рахунок збільшення кількості електронів, для яких виконується умова резонансного тунелювання. Після проходження екватора сфери Фермі хвильове число k_0 відповідно до співвідношення (7.4) стає комплексним, що пояснюється відсутністю електронних станів з резонансною енергією. Струм при цьому різко зменшується до нуля (рис. 7.3, а).

Положення рівня поперечної енергії у квантовій ямі можна регулювати прикладанням напруги (рис. 7.2, б). Нехай за нульової напруги єдиний рівень енергії лежить вище рівня Фермі. З підвищенням потенціалу колектора рівень енергії «опускається» та може набувати усіх значень від E_F до E_c та нижче. Відповідно струм через діод залежно від напруги набуватиме значення від нуля, коли $E_0 > E_F$, до максимального, коли $E_0 = 0$. Зі збільшенням напруги кількість електронів різко зменшується, що призводить до спаду струму: так формується ділянка від'ємної диференціальної провідності G_d , на якій $G_d = dI/dV < 0$.

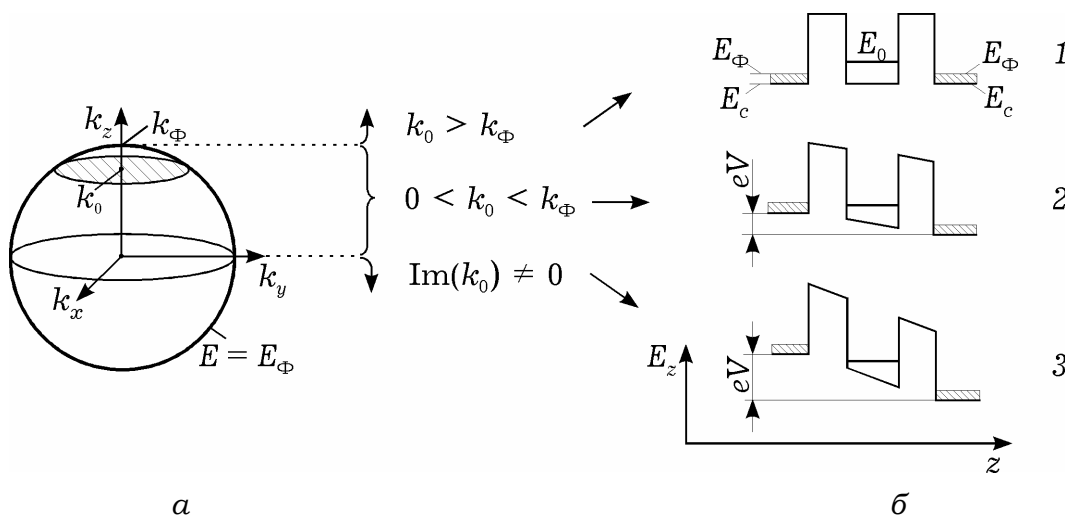


Рис. 7.2. Принцип роботи РТД: сфера Фермі, всередині якої перебувають усі можливі значення хвильового числа електронів з емітера, заштрихована ділянка позначає стани електронів, що здатні тунелювати за такого положення рівня у квантовій ямі (а); потенціальний рельєф ДБКС за різних зміщень (б): 1 – $V = 0$; 2 – «пікова» напруга; 3 – напруга, за якої рівень у квантовій ямі опустився нижче від дна зони провідності в емітері

Вольт-амперні характеристики експериментального зразка РТД, що описаний в [187], зображено на рис. 7.3, б. Принципова

їх відмінність від теоретичної кривої полягає в тому, що зі збільшенням напруги струм відразу ж починає зростати, і вже не опускається до нуля, а ділянка від'ємної диференціальної провідності має скінченний розмах за напругою. Такі відмінності пояснюються передусім так:

- рівні енергії у квантовій ямі насправді не дискретні, а мають скінченну ширину Γ . Це пояснюється тим, що час життя τ електрона в ямі за рахунок виходу через бар'єри виявляється скінченним, а тому відповідно до принципу невизначеності для енергії [22] енергетичні рівні «розмиваються» на величину невизначеності енергії, що має порядок $\Gamma \sim \hbar/\tau$. Відтак ширина ділянки ВДП за напругою скінченна, а форма ВАХ стає більш плавною;

- за ненульової температури межа між незаселеними та заселеними станами в емітері розмита (максимальна енергія електрона не обмежується E_F). Відтак зі зміною напруги поступово зростає кількість тунелюючих електронів і струм, ними створений, змінюється плавно;

- процеси розсіювання та хаотизації фази електрона під час тунелювання роблять умову резонансу (7.4) не єдиною, за якої можливе перенесення заряду з лівого до правого резервуара. Відомі механізми *нерезонансного* переносу, які суттєво збільшують струм «долини» ВАХ.

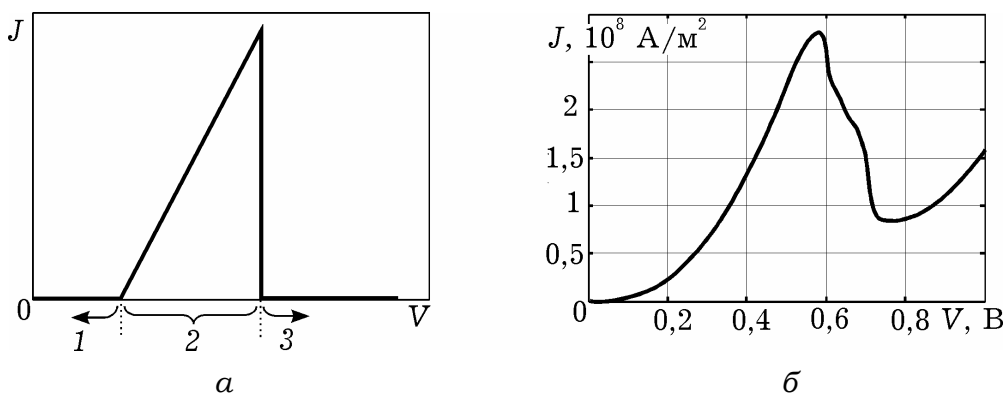


Рис. 7.3. Теоретична (а) та адаптована з [187] експериментальна ВАХ резонансно-тунельного діода (б); позначені ділянки теоретичної ВАХ відповідають характерним значенням резонансного хвильового числа:

$$1 - k_0 > k_F; 2 - 0 < k_0 < k_F; 3 - \text{Im}(k_0) < 0$$

7.1.3. Методика розрахунку струму

Підхід до розрахунку струму через структури з поперечним електронним транспортом подібний до того, що розглядався у підрозд. 1.5: «квантова область», яка є по суті мікроскопічною системою, описується як центр розсіювання. Для опису останнього можна використовувати хвильові матриці розсіювання чи передавання електронних хвиль. Покажемо, як, знаючи матрицю передачі квантової системи, можна розрахувати струм у межах формалізму Ландауера.

У резервуарах, де концентрація електронів висока, а спад напруги нехтовно малий, приймається припущення про рівноважність електронного газу. Вважається, що за деякої напруги V електрони у лівому та правому резервуарах підпорядковуються статистиці Фермі–Дірака з параметрами E_{F1} та E_{F2} відповідно, де $E_{F2} = E_{F1} - eV$ (рис. 7.4, а). Крім того, вважається, що резервуари поглинають усі електрони, які до них потрапляють.

Оскільки квантова область нелегована (для GaAs концентрація електронів у ній $n_i = 2.1 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-3}$ за температури 300 К), а резервуари легуються сильно ($N_d \sim 10^{24} \text{ м}^{-3}$), основну роль у явищах перенесення відіграють електрони лівого та правого резервуарів, які потрапляють до квантової області та рухаються в ній балістично. Цей процес нагадує процес термоелектронної емісії, що спостерігається у вакуумних діодах [188], однак у цьому випадку електрони емітуються не лише з «катода», але й з «анода».

Сумарний струм, який протікає через квантову область, можна розрахувати як суперпозицію струмів, які створюються електронами, що потрапляють туди з лівого та правого резервуарів (надалі – «ліві» та «праві» електрони). Густина останніх позначимо, відповідно, через \mathbf{J}_{12} та \mathbf{J}_{21} , а сумарну густина струму – через \mathbf{J} :

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{12} + \mathbf{J}_{21}.$$

Вважають, що потоки «лівих» та «правих» електронів між собою не взаємодіють. Взаємодія між електронами може бути врахована ефективно, якщо визнати, що кожен електрон рухається у полі кристалічної ґратки та полі, що його створює решта електронів (наближення Хартрі) [22; 189]. Припускають, що площа шарів гетероструктури настільки велика, що струм рівномірно розподіляється по поперечному перерізу площею S , тобто густина струму $\mathbf{J}_{12(21)} = \mathbf{e}_z (I_{12(21)} / S) \equiv \mathbf{e}_z J_{12(21)}$.

Для струмів «лівих» та «правих» електронів окремо мають виконуватися закони неперервності: $dJ_{12(21)}/dz = 0$, тому для електронів з лівого резервуара можна розрахувати струм в одній точці, а для електронів з правого – в іншій. Найбільш зручно розраховувати струм за формулою

$$J = J_{12}(z_R) + J_{21}(z_L), \quad (7.5)$$

де z_R та z_L – права та ліва межі квантової області (рис. 7.4). Точки z_L та z_R – це межові точки класичної області, тому в них електрон можна розглядати як квазікласичну частинку.

Електрон, що перебуває в точці z_R та має швидкість v , створює елементарний струм $j = ev_z$. Густина струму, який створюють електрони, швидкість яких міститься у межах від $v_z = \hbar k_z / m^*$ до $v_z + dv_z$, знаходять за формулою

$$dJ_{12} = e v_z dn(z_R) = e \frac{\hbar k_z}{m^*} dn(z_R), \quad (7.6)$$

де $dn(z_R)$ – концентрація електронів, що мають швидкості у зазначених межах, у точці z_R .

Припустимо, що нам відомий коефіцієнт проходження електроном квантової системи $T(E_z)$, який визначає імовірність проходження. Тоді концентрацію «лівих» електронів, які досягли правого резервуара, можна визначити за формулою $dn(z_R) = dn(z_L)T(E_z)$ (рис. 7.4). Якщо електрон долає квантову систему без розсіювання, ймовірність проходження залежить лише від поперечної енергії: $T = T(E_z)$.

Саме знаходження коефіцієнта проходження T є головною проблемою моделювання структур з поперечним транспортом,

оскільки він визначає електричні властивості мікроскопічної системи.

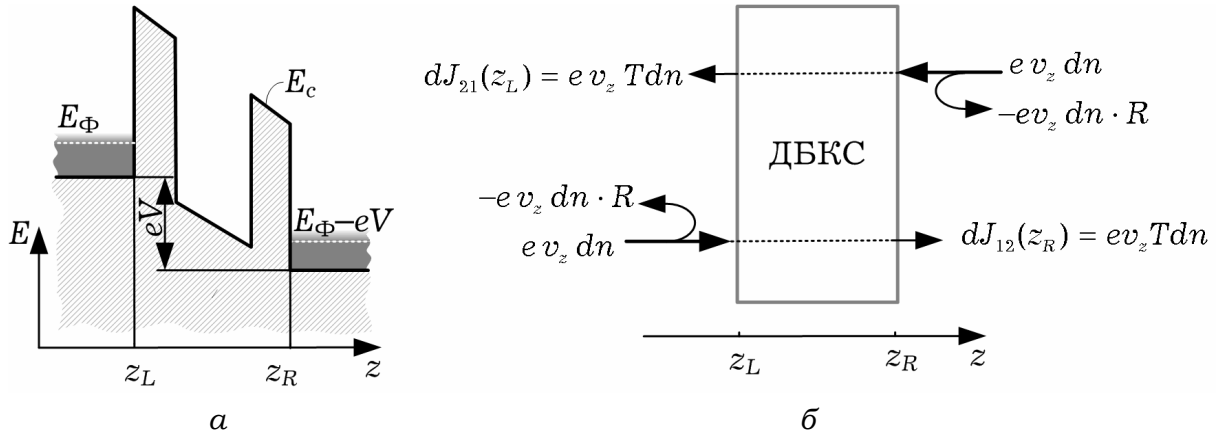


Рис. 7.4. Зонна діаграма ДБКС (а) та складові струму через неї (б)

Для знаходження J_{12} скористаємося тим, що концентрація електронів dn в елементарному об'ємі хвильових чисел $dV_k = dk_x dk_y dk_z$ становить

$$dn = g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})dV_k, \quad (7.7)$$

де $g(\mathbf{k})$ та $f(\mathbf{k})$ – густина станів та функція розподілу електронів у k -просторі в лівому резервуарі відповідно; $g(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^3$; $f(\mathbf{k}) = 1/(1 + e^\varepsilon)$, де, у свою чергу,

$$\varepsilon(E_\Phi, \mathbf{k}) \equiv \frac{E - E_\Phi}{k_B T} = \left(\underbrace{\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}}_{\equiv E_x} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}}_{\equiv E_y} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}}_{\equiv E_z} - eV - E_\Phi \right) / k_B T.$$

З урахуванням виразу (7.7) рівняння (7.6) у розкритому вигляді перепишемо так:

$$dJ_{12} = \frac{e\hbar k_z}{m^*} g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})T(E_z)dV_k = \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{k_z T(E_z)}{1 + \exp\{\varepsilon(\mathbf{k}, E_\Phi)\}} dV_k. \quad (7.8)$$

Оскільки коефіцієнт проходження залежить лише від поперечної енергії, у формулі (7.8) вдається провести інтегрування за проекціями хвильового вектора k_x та k_y . Між тим вид функції $T(E_z)$ навіть для найпростіших форм квантової області зазвичай не дозволяє провести інтегрування за k_z аналітично.

Інтегрування рівняння (7.8) слід проводити відповідно до частини k -простору, яка визначається нерівністю $k_z > 0$:

$$J_{12} = \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty T(E_z) \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{k_z}{1 + \exp\{\varepsilon(\mathbf{k}, E_\Phi)\}} dk_z dk_x dk_y. \quad (7.9)$$

(Ці межі охоплюють усі стани електронів, що рухаються зліва направо та мають довільні позовжні швидкості.)

Інтегруючи вираз (7.9) за k_x та k_y і переходячи до інтегрування за енергію, отримаємо (див. дод. Д7.1):

$$J_{12} = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^\infty T(E_z) \cdot \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_\Phi - eV}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (7.10)$$

де нижня межа інтегрування враховує відсутність у лівому резервуарі електронів з енергією, меншою за eV .

Аналогічно знайдемо J_{21} , (див. дод. Д7.1):

$$J_{21} = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E_z) \cdot \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_\Phi}{k_B T} \right) \right) dE_z. \quad (7.11)$$

Підставивши вирази (7.10) та (7.11) у рівняння (7.5), отримаємо відому *формулу Цу–Есакі* [190]:

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^\infty T(E_z) D(E_z) dE_z, \quad (7.12)$$

де $D(E_z)$ – функція постачання електронів (англ. *supply function*):

$$D(E) \equiv \ln \left(\frac{1 + \exp(-(E_z - E_\Phi) / k_B T)}{1 + \exp(-E_z - (E_\Phi - eV) / k_B T)} \right).$$

Із двох нижніх меж – 0 та eV – було вибрано найбільшу, бо для станів з $E_z < eV$ маємо $T(E_z) = 0$.

Із формули Цу–Есакі випливає, що задача знаходження ВАХ $J(V)$ зводиться до визначення коефіцієнта проходження $T(E_z, V)$, за відомого потенціального рельєфа ця задача схожа на класичну квантово-механічну задачу про проходження електроном деякого потенціального рельєфа (наприклад, прямокутного потенціального бар'єра).

7.2. УМОВНО-АНАЛІТИЧНІ МОДЕЛІ

З часу формування перших уявлень про функціонування напівпровідникових структур з поперечним транспортом було розроблено багато аналітичних методів для обчислення коефіцієнта проходження електроном квантової структури, однак складність виразів зазвичай не дозволяє застосовувати їх без спрощень. Здебільшого їх використовують для побудови чисельних моделей – з цієї причини будемо використовувати як префікс слово «умовно-» в їх назві. Винятком є метод *лоренцової модельної функції* (підрозд. 7.2.2), однак його застосовність обмежена виключно РТД за умови малих зміщень.

Узагальнений підхід усіх методів полягає в тому, щоб знайти матрицю передачі квантової системи, тобто матрицю, яка пов'язує падаючі та відбиті електронні хвилі з обох боків квантової системи. Знаючи елементи матриці передачі, знаходять коефіцієнт проходження.

Матриця передачі вводиться згідно з прийнятими припущеннями. За межами квантової системи спаду прикладеної напруги немає, тому електрон перебуває виключно у полі кристалічної ґратки й обвідна його хвильової функції розглядається як суперпозиція падаючих та відбитих плоских хвиль. Тому розв'язання рівняння Шредінгера для лівого та правого резервуарів (на рис. 7.5, а це I та V ділянки) можна записати:

$$\psi_I = A_I e^{ik_I z} + B_I e^{-ik_I z}; \quad (7.13)$$

$$\psi_V = A_V e^{ik_V x} + B_V e^{-ik_V x}, \quad (7.14)$$

де A_I, B_I, A_V, B_V – сталі інтегрування; $k_{I(V)} = \sqrt{2m_{I(V)}^*(E_z - U_{I(V)})}/\hbar$, де $m_{I(V)}^*$ – ефективна маса електрона на I (V) ділянці; $U_{I(V)}$ – потенціальна енергія електрона («потенціальний рельєф») на I (V) ділянці.

Уведемо позначення для членів виразів (7.13), (7.14):

$$\psi_I^{\rightarrow} \equiv A_I e^{ik_I z}, \quad \psi_I^{\leftarrow} \equiv B_I e^{-ik_I z}, \quad \psi_V^{\rightarrow} \equiv A_V e^{ik_V z}, \quad \psi_V^{\leftarrow} \equiv B_V e^{-ik_V z},$$

які традиційно називають, відповідно, падаючими та відбитими хвилями на першій та п'ятій ділянках. Ці хвилі описують електрон, що налітає на квантову область чи відбивається від неї зліва чи справа.

Матриця передачі усієї квантової системи \mathbf{M} вводиться так:

$$\begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}. \quad (7.15)$$

Знаючи \mathbf{M} , можна знайти коефіцієнт проходження $T(E_z)$ квантової системи. За визначенням [181]:

$$T(E_z) = \frac{j_V^{\rightarrow}}{j_1^{\rightarrow}}, \quad (7.16)$$

де j_V^{\rightarrow} – потік густини ймовірності в електронній хвилі, що пройшла у п'яту ділянку; j_1^{\rightarrow} – потік густини ймовірності у падаючій хвилі на першій ділянці. Згідно з визначенням потоку густини ймовірності

$$j_{V(I)}^{\rightarrow} = \frac{i\hbar}{2m_{V(I)}^*} \left(\{\psi_{V(I)}^{\rightarrow}\}^* \frac{d\psi_{V(I)}^{\rightarrow}}{dz} - \psi_{V(I)}^{\rightarrow} \frac{d\{\psi_{V(I)}^{\rightarrow}\}^*}{dz} \right).$$

Прості обчислення дають

$$j_V^{\rightarrow} = |A_V|^2 \frac{\hbar k_V}{m_V^*}; \quad j_1^{\rightarrow} = |A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m_1^*}.$$

Підставляючи ці значення у формулу (7.17), отримаємо:

$$T(E_z) = \frac{|A_V|^2}{|A_1|^2} \frac{k_V}{k_1} \frac{m_1^*}{m_V^*}. \quad (7.17)$$

З формули (7.17) слідує: якщо потенціальна енергія електрона у лівому чи правому резервуарі менша за повну енергію електрона (хвильовий вектор набуває уявного значення), то такий електрон не робить внеску в струм, оскільки ймовірність проходження виявляється уявною. Останнє вказує на неможливість такої події.

Коефіцієнт відбиття від квантової системи визначають як

$$R = -\frac{j_1^{\leftarrow}}{j_1^{\rightarrow}}, \quad (7.18)$$

де $j_1^{\leftarrow} = \frac{i\hbar}{2m_I^*} \left(\{\psi_I^{\leftarrow}\} * \frac{d\psi_I^{\leftarrow}}{dz} - \psi_I^{\leftarrow} \frac{d\{\psi_I^{\leftarrow}\}}{dz} \right)$ – потік густини ймовірності у відбитій до першої ділянки електронній хвилі.

Прості обчислення дають змогу записати вираз (7.18) у вигляді

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}. \quad (7.19)$$

Знайдемо коефіцієнт проходження для електрона, що налітає на квантову систему з лівого резервуара. Оскільки резервуари є ідеально адсорбуючими, хвилі, відбитої від правого резервуара $\psi_V^{\leftarrow} \equiv B_V e^{-ik_5 z}$, не буде. Без втрати загальності можна нормувати хвильову функцію у лівому резервуарі так, що $A_I = 1$. Тоді амплітуди A_V та B_I набудуть змісту комплексних коефіцієнтів проходження та відбивання, які позначимо $t \equiv A_V$, $r \equiv B_I$. Таким чином, для електрона, що налітає на квантову систему зліва, формули (7.17) та (7.19) можна переписати так:

$$T(E_z) = |t|^2 \frac{|k_V|}{|k_I|} \frac{m_I^*}{m_V^*}; \quad (7.20)$$

$$R = |r|^2. \quad (7.21)$$

Формула (7.15) у введених позначеннях матиме вигляд

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}, \quad (7.22)$$

де невідомими є коефіцієнти t та r , знайшовши які, матимемо змогу обчислити $T(E_z)$ та R згідно з формулами (7.20) та (7.21). Провівши елементарні обчислення, з (7.22) отримаємо:

$$t = \frac{m_{11} + m_{12} m_{21}}{m_{22}}; \quad (7.23)$$

$$r = -\frac{m_{21}}{m_{22}}. \quad (7.24)$$

Отже, якщо матриця передачі квантової системи відома, формули (7.20), (7.21), (7.23), (7.24) дозволяють обчислити коефіцієнти проходження та відбивання.

Зазначимо, що закон збереження густини потоку ймовірності в обвідній хвильовій функції, як і у власне хвильовій функції [181], передбачає виконання умови

$$T(E_z) + R(E_z) = 1,$$

крім того, у [22] показано, що для електронів, які налітають справа чи зліва, коефіцієнти відбивання та проходження однакові: $T_{12} = T_{21}$; $R_{12} = R_{21}$. Відтак у формулі Цу–Есакі фігурує один коефіцієнт проходження: $T(E_z) \equiv T_{12} = T_{21}$. Системи, що задовольняють вказані умови, називають *оборотними системами* без втрат. Для компонентів матриці **M**, що описує вказані системи, справедливі рівності $m_{11} = m_{22}^*$; $m_{12} = m_{21}^*$ [191].

7.2.1. Метод плоских хвиль

Метод плоских хвиль застосовують для знаходження коефіцієнта проходження через квантові системи, потенціальна енергія електрона в яких може бути апроксимована кусково-сталою функцією (рис. 7.5, а, б). Апроксимація, що показана на рис. 7.5, а суцільною лінією, є виправданою, коли до системи прикладається невелике зміщення, а впливом просторового заряду можна знехтувати.

На будь-яких двох i -й та $(i + 1)$ -й суміжних ділянках зі сталим потенціальним рельєфом розв'язком рівняння Шредінгера буде суперпозиція плоских хвиль:

$$\psi_i = A_i e^{ik_i z} + B_i e^{-ik_i z}; \quad (7.25)$$

$$\psi_{i+1} = A_{i+1} e^{ik_{i+1} z} + B_{i+1} e^{-ik_{i+1} z}, \quad (7.26)$$

де $k_i = \sqrt{2m_i^*(U_i - E_z)} / \hbar$, де m_i^* – ефективна маса електрона в i -му шарі; U_i – потенціальна енергія електрона в зоні провідності i -го шару.

На межі між i -ю та $(i+1)$ -ю областями в точці $z_{i,i+1}$ хвильова функція та потік імовірності в ній мають бути неперервними, тобто необхідно забезпечити виконання рівнянь (див. також підрозд. 1.5):

$$\psi_i(z_{i,i+1}) = \psi_{i+1}(z_{i,i+1}); \quad (7.27)$$

$$\frac{1}{m_i^*} \psi'_i(z_{i,i+1}) = \frac{1}{m_{i+1}^*} \psi'_{i+1}(z_{i,i+1}), \quad (7.28)$$

де штрихом позначено диференціювання за z .

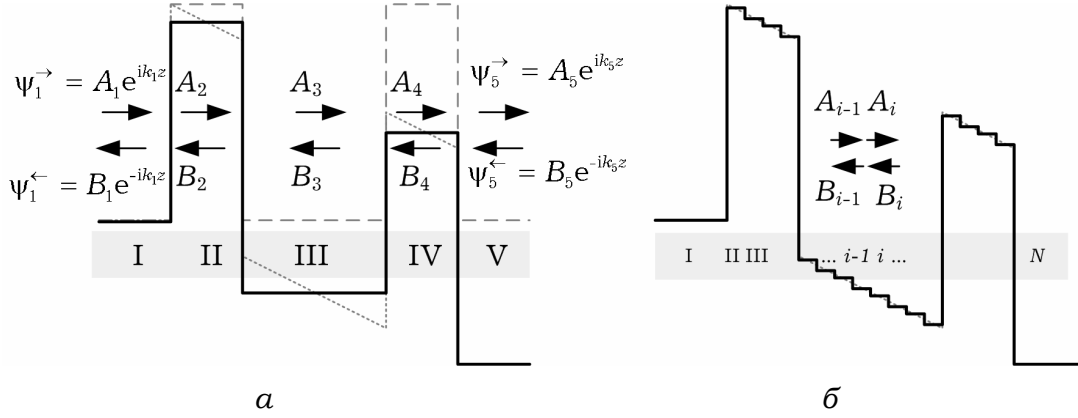


Рис. 7.5. Апроксимації потенціального рельєфу ДБКС, які можна описати матрицями передачі плоских хвиль (суцільні лінії)

З урахуванням рівнянь (7.25) та (7.26) з (7.26) та (7.28) можна отримати матричне рівняння, що пов'язує $[A_{i+1} \ B_{i+1}]^T$ з $[A_i \ B_i]^T$:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}, \quad (7.29)$$

де $\mathbf{M}_{i,i+1} = \begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}z} & e^{-ik_{i+1}z} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{ik_{i+1}z} & -\frac{k_{i+1}}{m_i^*} e^{-ik_{i+1}z} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_i z} & e^{-ik_i z} \\ \frac{k_i}{m_i^*} e^{ik_i z} & -\frac{k_i}{m_i^*} e^{-ik_i z} \end{bmatrix}$ —

матриця передачі електронних хвиль (або просто \mathbf{M} -матриця), що виражає амплітуди електронних хвиль у $(i+1)$ -му шарі через амплітуди в i -му шарі.

Аналогічно можна отримати рівняння, що пов'язує відповідні амплітуди в $(i-1)$ -му та i -му шарі:

$$\begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix}. \quad (7.30)$$

Використовуючи вирази (7.29) та (7.30), можна виразити $[A_{i+1}, B_{i+1}]^T$ через $[A_{i-1}, B_{i-1}]^T$:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \times \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix},$$

звідки видно, що \mathbf{M} -матриці мультиплікативні.

Легко переконатися, що вказана властивість \mathbf{M} -матриць дозволяє виразити амплітуди падаючих та відбитих хвиль у лівому резервуарі через аналогічні величини правого резервуара:

$$\begin{bmatrix} A_N \\ B_N \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{N,N-1} \times \mathbf{M}_{N-1,N-2} \times \dots \times \mathbf{M}_{2,1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \prod_{i=2}^N \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}.$$

Матриця $\mathbf{M} = \prod_{i=2}^N \mathbf{M}_{i,i-1}$ є шуканою матрицею передачі усієї квантової системи.

Застосуємо метод плоских хвиль до ДБКС модельного РТД, що складається з AlAs-бар'єрів шириною $b = 1,7$ нм та з GaAs-ями шириною $a = 4,5$ нм. Відносні ефективні маси у відповідних шарах мають значення $m_{\text{AlAs}} = 0,15$; $m_{\text{GaAs}} = 0,067$. Розрив зони провідності у місці контакту $U_0 = 1$ еВ. Концентрація донорних домішок у резервуарах $N_d = 2,5 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$ (рис. 7.6).

Залежність коефіцієнта проходження від поперечної енергії електрона для кількох значень напруги показано на рис. 7.7. Потенціальний рельєф залежно від прикладеної напруги апроксимувався згідно з рис. 7.5, а.

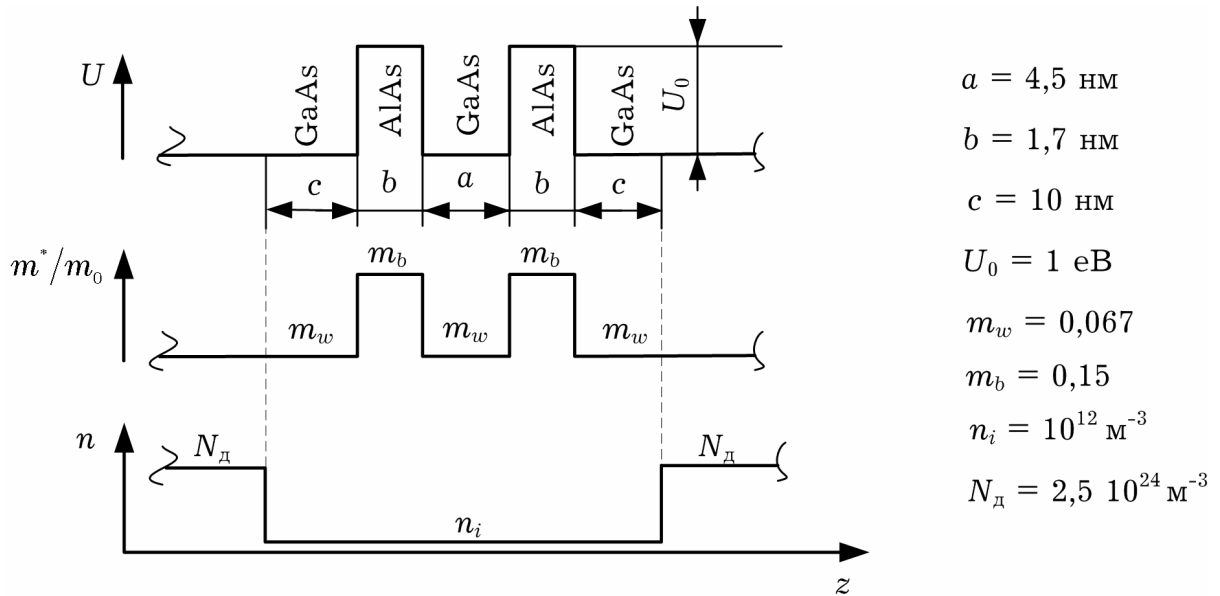


Рис. 7.6. Топологія активної частини модельного РТД

7.2.2. Використання лоренцової модельної функції

Використання матриць передачі на практиці потребує чисельної реалізації, а множення п'яти матриць призводить до складного з погляду можливості математичного аналізу виразу для коефіцієнта передачі (хоча такі спроби здійснювалися [192]). Наприклад, як пояснити резонансний характер залежності коефіцієнта проходження для РТД (рис. 7.7)? Виявляється, що для РТД можна користуватися функціями, *суперпозиція* яких задовільно апроксимує резонансний характер залежності $T(E_z)$ – їх називають функціями *лоренцового типу* й описують формулою

$$T_i(E_z) = \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + 4(E_z - E_i)^2}, \quad (7.31)$$

де Γ_i – величина розширення резонансного рівня, яке зумовлене принципом невизначеності Гейзенберга для енергії; E_i – положення i -го метастабільного рівня у квантовій ямі. Легко бачити, що $T_i(E_i) = 1$, а за $|E_z - E_i| \gg \Gamma_i$ $T_i(E_i) \rightarrow 0$, тобто ця функція описує деяку резонансну залежність.

Іноді формулу (7.31) також називають формулою Брейта–Вігнера; її вперше було отримано та використано для опису процесів резонансного розсіювання нейтронів на атомних ядрах. Для тривимірного сферичного потенціального бар'єра одна з форм цієї формули виводиться, наприклад, у роботі [181].

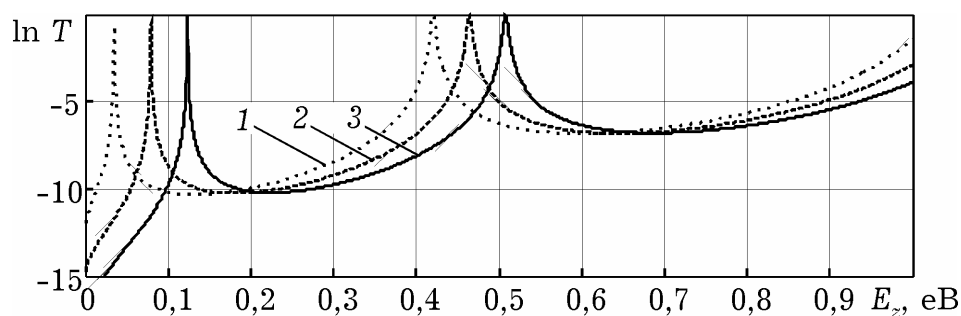


Рис. 7.7. Залежність коефіцієнта проходження модельного діода, розрахована методом матриць передачі за напруг:
1 – 0 В; 2 – 0,1 В; 3 – 0,2 В

У квантовій теорії збурень особливе місце належить задачі, коли збурення мале, однак його вид такий, що спектр квантової системи з дискретного стає неперервним [22; 181]. Така задача виникає, коли незбуреною системою є яма, оточена нескінченно широкими потенціальними бар'єрами (рис. 7.8, а), а збуреною – така ж яма, але оточена достатньо широкими бар'єрами скінченної ширини (рис. 7.8, б), настільки широкими, щоб збурення можна було вважати малим. Для резонансно-тунельних діодів, що мають більш-менш якісні електричні характеристики, це завжди виконується.

У системі, зображеній на рис. 7.8, а, за енергії, що менша від висоти бар'єра, спектр енергії електрона дискретний. Говорять, що електрон *локалізований* у квантовій ямі. Ймовірність знайти його на нескінченності дорівнює нулю, енергія ж – фіксована (невизначеність енергії $\Delta E = 0$). Справді, згідно з принципом невизначеності Гейзенберга для енергії [22]:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar, \quad (7.32)$$

оскільки ж електрон перебуває у квантовій ямі нескінченно довго ($\Delta t \rightarrow \infty$), умова (7.32) виконується, якщо $\Delta E = 0$.

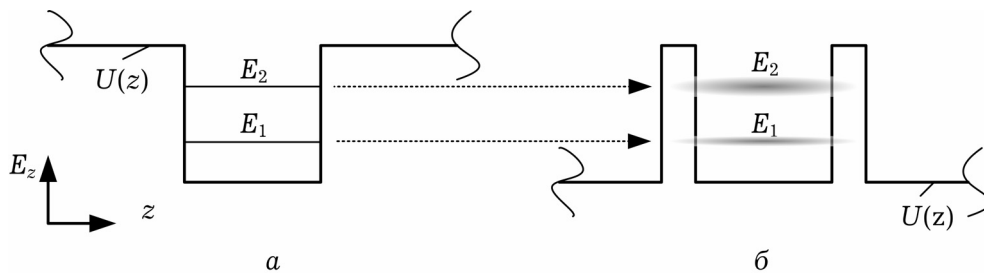


Рис. 7.8. Утворення метастабільних рівнів енергії: незбурена система (ширина бар'єрів нескінченна) (а); збурена система (ширина бар'єрів скінченна) (б)

Ситуація принципово змінюється, коли бар'єри мають скінченну ширину (рис. 7.8, б). Рух електрона в цьому випадку буде інфінітним, а спектр *неперервним*. Однак і в цьому випадку ймовірність знайти електрон у ямі буде найбільшою поблизу дискретних рівнів енергії незбуреної системи та зменшуватиметься з віддаленням від них. Кажуть, що дискретні рівні енергії «розмиваються». Якщо величина ΔE значно менша за відстань

між дискретними рівнями, такий спектр називають «квазідискретним». Останній – особливий випадок *неперервного* спектра.

Отже, у формулі (7.31) E_i – це власні енергії *незбуреної* системи (рис. 7.8, а) для дискретного спектра.

З формули (7.31) випливає що за $E_z = E_i$ функція $T(E_z)$ має максимуми, які дорівнюють одиниці. Якщо власними частотами системи вважати частоти ДБКС $\omega_{0,i} = E_i / \hbar$, а зовнішніми – частоти хвилі де Бройля електронів $\omega_{\text{зовн}} = E_z / \hbar$, то рівність $E_z = E_i$ являє собою класичне визначення резонансу. Явище проходження ДБКС електроном, що має резонансну енергію, називають *резонансним тунелюванням*.

Розмиті рівні енергії, про які йшлося, називають *метастабільними*, а середній час руху електрона на них Δt називають часом життя цього *метастабільного стану*.

Величина Γ_i у формулі (7.32) – це ширина i -го метастабільного рівня. Її називають «*природнім розширенням*» відповідного рівня, яке визначається як

$$\Gamma_i = \frac{\hbar}{\tau_i}, \quad (7.33)$$

де τ_i – середній час життя метастабільного стану.

Величина Γ_i має такий фізичний зміст. Для системи, коефіцієнт проходження якої описується лоренцовою функцією, частина електронів, що пройшла через систему в діапазоні Γ_i із центром у $E_z = E_i$, буде становити $1 / \sqrt{2} \approx 0,707$ від загальної кількості електронів, що пройшли через ДБКС за всіх можливих енергій (за умови, що розподіл електронів за енергіями рівномірний). Умовно кажучи, «вікно прозорості» квантової системи має порядок Γ_i .

Час життя в (7.33) знаходять із квазікласичних уявлень. Під час кожного відбиття від i -го бар'єра частина $T_i = 1 - R_i$ електронної хвилі «витікає» з ями. Частота зіткнень електрона з бар'єрами ν_i становить приблизно $2a/\nu_i$, де ν_i – швидкість руху електрона на i -му метастабільному рівні, $\nu_i = \sqrt{2E_i / m^*}$;

a – ширина квантової ями. Ймовірність того, що при зіткненні з бар'єром електрон залишить квантову яму, становить $T_i^{(1)}$ для лівого та $T_i^{(2)}$ для правого бар'єрів. Вказані оцінки справедливі за умови $|T_i^{(1)}| \ll 1$; $|T_i^{(2)}| \ll 1$, тоді величину τ_i можна наближено розрахувати за формулою

$$\tau_i = \frac{2a}{v_i} \left(\frac{1}{T_i^{(1)} + T_i^{(2)}} \right). \quad (7.34)$$

Якщо у квантовій ямі резонансно-тунельного діода перебуває N метастабільних рівнів енергії, то функція $T(E_z)$ може бути апроксимована сумою функцій лоренцового типу:

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + 4(E_z - E_i)^2}. \quad (7.35)$$

Якщо у квантовій ямі є інші механізми, що дозволяють електрону залишити енергетичний рівень, наприклад процеси розсіювання, то в межах лоренцової апроксимації їх теж можна врахувати. Нехай сумарний час релаксації за всіма механізмами релаксації дорівнює τ_p і визначається звичайним чином:

$$\frac{1}{\tau_p} = \sum_n \lambda_n,$$

де λ_n – частоти n -го виду розсіювання. З часом τ_p так само, як і з часом τ_i , можна пов'язати додаткове розширення метастабільного рівня:

$$\Gamma_p = \frac{\hbar}{\tau_p}, \quad (7.36)$$

яке називають «релаксаційним».

За аналогією з резонатором Фабрі–Перро [193] або відповідно до квантової теорії можна показати, що з урахуванням розсіювання формулу (7.35) можна уточнити й отримати

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_{\Sigma,i}^2 + 4(E_z - E_i)^2}, \quad (7.37)$$

де $\Gamma_{\Sigma,i}$ – сумарне розширення i -го енергетичного рівня, $\Gamma_{\Sigma,i} = \Gamma_i + \Gamma_p$.

7.2.3. Напіваналітична спрощена модель резонансно-тунельного діода

За допомогою формули (7.37) та формули Цу–Есакі можна побудувати спрощену аналітичну модель РТД [194]. Перевагами такої моделі над чисельними є простота й інтуїтивно зрозумілий зміст величин, що обчислюються на шляху отримання ВАХ, а також часткова аналітичність.

Пошук залежності $J(V)$ зводиться до таких кроків (див. підрозд. 7.2.2):

1. Пошук сумарної кількості N та енергії E_i дискретних рівнів у незбуреній системі (задача на власні енергії для потенціального рельєфу з рис. 7.8, а).

2. Пошук коефіцієнтів проходження для кожного з двох потенціальних бар'єрів, $T^{(1)}$ та $T^{(2)}$ (рис. 7.8, б).

3. Пошук величин «природного» та «релаксаційного» розширення метастабільних енергетичних рівнів у квантовій ямі за формулами (7.33), (7.34) та (7.36).

4. Використання розрахованих величин для отримання ВАХ з формули Цу–Есакі (7.12).

Знайти кількість та енергію дискретних рівнів у квантовій ямі, оточеній нескінченно широкими бар'єрами (рис. 7.8, а), можна, розв'язавши відповідну квазіквантовомеханічну задачу, яка лише трохи складніша від розглянутої в роботі [22].

Розрахунки дозволяють отримати такі формули [195]. Кількість метастабільних рівнів у квантовій ямі:

$$N = \left[\frac{2\sqrt{m_b}}{\pi\gamma} \right] + 1 = \left[\sqrt{\frac{m_b}{m_0} \frac{m_w}{m_0}} \frac{2}{\pi\gamma_0} \right] + 1, \quad (7.38)$$

де $[x]$ позначає цілу частину x ; m_0 , m_w , m_b – маса спокою електрона та ефективні маси електрона в ямі та бар'єрі; $\gamma^2 = 2\hbar^2 / m_w U a^2$, $\gamma_0^2 = 2\hbar^2 / m_0 U a^2$; U – висота потенціального бар'єра; a – ширина ями.

Власні енергії електрона у квантовій ямі можуть бути знайдені з трансцендентного рівняння

$$(-1)^{n+1} \cos\left(\frac{\pi}{2}(n-1) - \xi\right) = (-1)^{n+1} / \sqrt{1 + \frac{m_w}{m_b} \left(\frac{1}{\gamma^2 \xi^2} - 1\right)}, \quad (7.39)$$

де

$$\xi = \frac{ka}{2}, \quad k = \frac{\sqrt{2m_w E}}{\hbar}. \quad (7.40)$$

За $m_w = m_b$ права частина рівняння (7.39) є рівнянням прямої: $f(\xi) = \pm\gamma\xi$, (якщо ж $m_w \neq m_b$, то це будуть деякі криві, що виходять з точки (0;0)), ліва – залежно від парності n – синусом або косинусом. Точки перетину двох згаданих функцій є шуканими ξ_i , яким відповідають шукані E_i згідно з виразами (7.40). Один із можливих способів графічного розв’язку (7.39) показано на рис. 7.9.

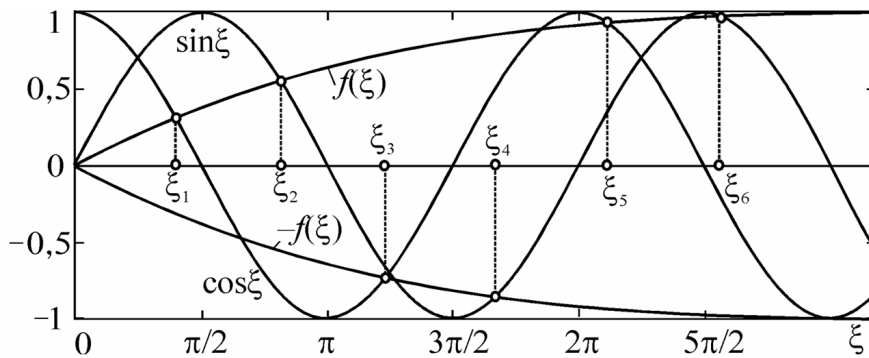


Рис. 7.9. Графічний розв’язок рівняння (7.39) – показано точки перетину кривих $f(\xi)$ та кривих $\sin(\xi)$ чи $\cos(\xi)$ – корені рівняння

Коефіцієнт проходження через прямокутні потенціальні бар’єри можна розрахувати, наприклад, користуючись методом матриць передачі. Формула для електрона з енергією $E_z = E_i$ має вигляд

$$T_i = \frac{4C_i^2}{(C_i + 1)^2 \operatorname{sh}^2 b\chi_i + 4C_i^2},$$

де b – ширина бар’єра; $C_i = (k_i / \chi_i)(m_2^* / m_1^*)$, $\hbar k_i = \sqrt{2m_b^* E_i}$;

$\hbar \chi_i = \sqrt{2m_2^* (U_0 - E_i)}$; U_0 – висота потенціального бар’єра.

У найпростішому випадку можна знехтувати залежністю

$T_{1(2)}$ від прикладеної до ДБКС напруги V і вважати, що під впливом напруги рівні енергії опускаються на величину $eV/2$:

$$E_i(V) = E_i(0) - \frac{eV}{2}.$$

Після того, як за енергій E_i проникності лівого та правого бар'єрів $T_i^{(1)}$ та $T_i^{(2)}$ знайдено, природне розширення i -го резонансного рівня Γ_i можна визначити з рівняння (7.33).

Найбільш суттєвим механізмом розсіювання в GaAs за кімнатної температури є полярне оптичне розсіювання. Наближено можна вважати, що час релаксації імпульсу в квантовій ямі збігається з часом релаксації у тривимірному напівпровіднику [8], який визначають за формулою

$$\frac{1}{\tau_p} = \alpha \omega_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{t^{1/2}}{\text{sht}} K_0(t), \quad (7.41)$$

де α – полярна стала для GaAs; $t = \hbar \omega_0 / 2k_B T$; K_0 – функція Бесселя нульового порядку другого роду.

За нульового зміщення суперпозиція лоренцових функцій є хорошою апроксимацією функції проходження, особливо для низьких енергетичних рівнів, про що свідчить рис. 7.10, де на одному графіку зображено $T(E_z)$, що розрахована методом матриць передачі, та $T(E_z)$, розрахована відповідно до формули (7.35) для тієї ж структури з рис. 7.6. Для вищих енергетичних рівнів (другий пік на рис. 7.10) апроксимація менш точна, оскільки для значення енергії $E_z = E_2$ умова для проникності бар'єрів $T^{(i)} \ll 1$ виконується гірше.

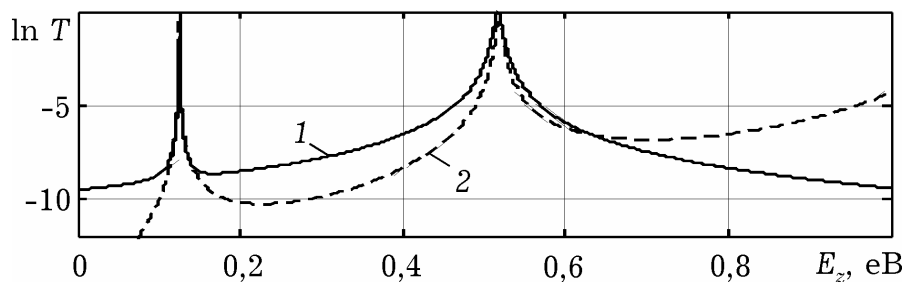


Рис. 7.10. Коефіцієнт проходження модельного РТД за нульової напруги, розрахований: 1 – з використанням суми лоренцових модельних функцій (формула (7.35)); 2 – методом матриць передачі

Одна з проблем, яку доводиться вирішувати під час проектування РТД, полягає у підвищенні *контрастності* (відношення пікового струму до струму в долині РТД) ВАХ. Причина полягає у наявності розсіювання та хаотизації фази електронів у квантовій ямі. Моделі, які не враховують ці фактори, дають сильно занижені значення струму в долині ВАХ.

Непружне розсіювання в ямі РТД призводить до того, що електрон з резонансною енергією ($E_z = E_i$) має скінченну ймовірність її змінити за рахунок взаємодії з полярними оптичними фононами, які в GaAs мають енергію $\hbar\omega \approx 36$ МеВ. Ймовірність проходження електроном квантової системи з енергією, що близька до резонансної, спадає, і навіть за $E_z = E_i$ не дорівнює одиниці. Процеси розсіювання моделюються введенням релаксаційного розширення рівня, ширина якого становить Γ_p , на додачу до природного розширення кожного i -го рівня, Γ_i .

Зміну форми $T(E_z)$ за аналогією із загасанням електромагнітної хвилі у резонаторі Фарбі–Перро [193] дозволяє врахувати формула (7.37). Зазначимо, що такий підхід є внутрішньо суперечливим, оскільки механізм розсіювання електрона не супроводжується загасанням хвильової функції (що спостерігається для електромагнітної хвилі). Останнє означало б фактичне зникнення частини електронів, чого звичайно ж не спостерігається у квантовій ямі; натомість має виконуватися закон неперервності струму.

Також критиці піддають використання для розрахунку Γ_p часу релаксації *імпульсу*. Згідно з квантовою статистикою є більше підстав використовувати в цій ролі час релаксації *фази* [196; 130].

Незважаючи на вказані недоліки формула (7.37) дозволяє максимально просто врахувати розсіювання в ямі РТД. Час релаксації імпульсу, розрахований за формулою (7.41), збільшується з підвищенням температури, що призводить до збільшення Γ_p ,

тобто додаткового «розмиття» функції $T(E_z)$ (рис. 7.11, а), і, зрештою, до зниження контрастності ВАХ (рис. 7.11, б). Інші механізми, зокрема «надбар'єрне» проходження та «розмиття» функції розподілу, спричиняють підняття струму долини. Останнє особливо помітне для РТД з «низькими» бар'єрами (наприклад, $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.77}\text{As}$); такі діоди, втім, нині мають лише історичне значення. Для AlAs/GaAs РТД надбар'єрним проходженням можна знехтувати.

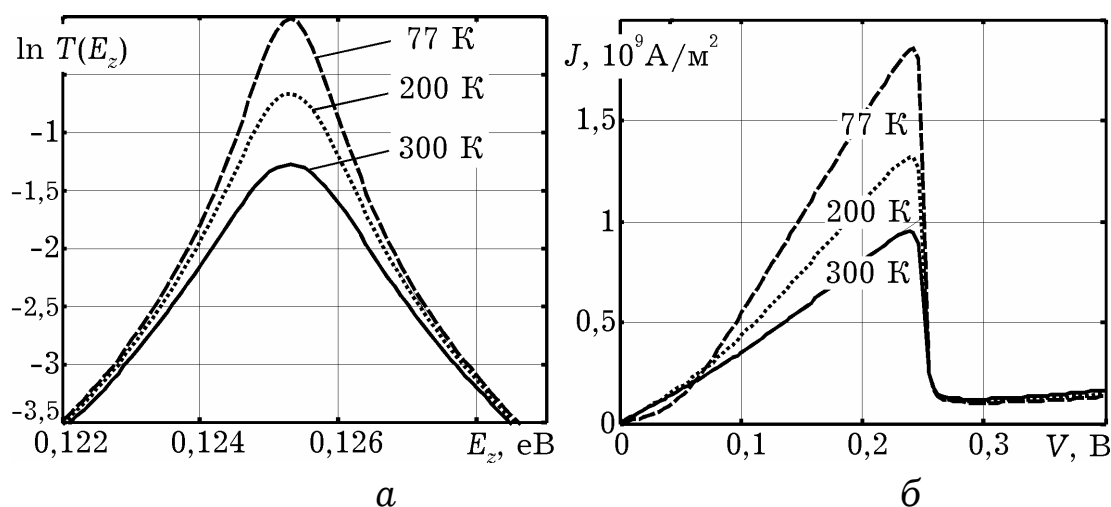


Рис. 7.11. Функція проходження ДБКС $T(E_z)$ (а) та ВАХ резонансно-тунельного діода (б) за різних температур

Це корелюється з експериментальними ВАХ, на яких з моменту створення перших РТД (1973 р.) до 1985 р. не вдавалося отримати ділянки з від'ємною диференціальною провідністю за кімнатної температури.

Як уже згадувалося, для другого енергетичного рівня модельної структури апроксимація лоренцовими функціями дає завищені значення проникності двобар'єрної квантової системи (рис. 7.10). Відтак і струм, зумовлений тунелюванням через другий метастабільний рівень, перевищує

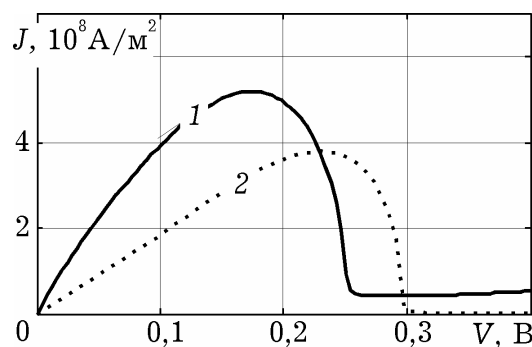


Рис. 7.12. Вольт-амперна характеристика модельного РТД, розрахована з використанням: 1 – лоренцевої апроксимації $T(E_z)$; 2 – методу матриць передачі (розсіюванням знехтувано)

значення, розраховане методом матриць передачі (рис. 7.12). Крім того, похибки виникають в разі апроксимації зміни потенціального рельєфа під дією напруги зміщення V (вважається, що дно потенціальної ями разом з рівнями енергії в ній «опускається» на величину $eV/2$).

7.2.4. Інші умовно-аналітичні методи

Для кусково-сталого потенціального рельєфа вигляд розв'язку рівняння Шредінгера на кожній ділянці відомий – це плоскі хвилі. Крім кусково-сталого потенціалу щонайменше для двох – кусково-лінійного та кусково-квадратичного – вигляд розв'язку рівняння Шредінгера відомий: для першого випадку розв'язками будуть функції Ейрі [197; 198], для другого – функції параболічного циліндра [199].

Однак суттєва перепона на шляху до використання методів матриць передачі – їх чисельна нестійкість. Так, якщо збільшити кількість шарів у структурі, що зображена на рис. 7.4 (десятибар'єрна квантова система), метод втрачає чисельну стійкість за рахунок поганої обумовленості результуючої матриці передачі системи (рис. 7.13).

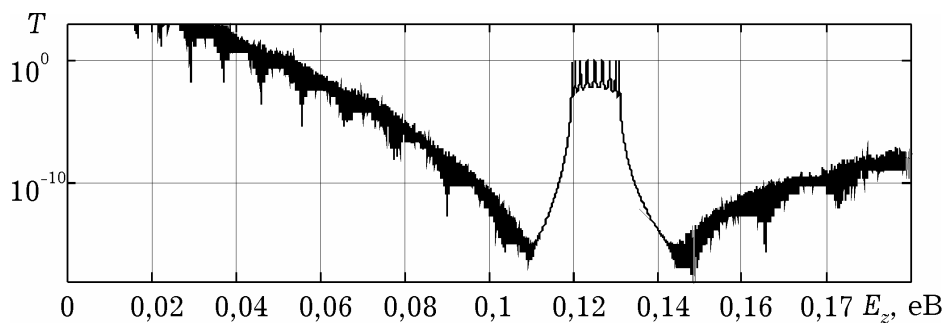


Рис. 7.13. Коефіцієнт проходження десятибар'єрної квантової системи, розрахований методом матриць передачі; через похибку, обумовлену чисельною нестійкістю, є ділянки, де $T(E_z) > 1$

Навіть якщо процедура множення матриць не призводить до утворення погано обумовленої матриці, вона все ж потребує не виправдано багато часу на обчислення, якщо кількість просторових інтервалів досить велика. Це спостерігатиметься, якщо рельєф сильно нелінійний, що можна бачити, наприклад, у разі

врахування просторового заряду. Відтак виникає потреба у створенні швидких та стабільних методів знаходження коефіцієнта передачі. Цього можна досягти, використовуючи чисельні методи інтегрування рівняння Шредінгера.

7.3. ЧИСЕЛЬНІ МОДЕЛІ

Кількісне моделювання пристроїв з поперечним електронним транспортом можливе лише за використання чисельних методів. Припущення, що приймають під час чисельного моделювання, аналогічні описаним у підрозд. 7.1. Взаємодія між електронами враховується в наближенні Хартрі, тобто вважається, що електрони рухаються в полі кристалічної ґратки та потенціалу, який створюють усі інші електрони («самоузгоджене поле»).

Побудова чисельної моделі включає такі кроки:

- концентрація електронів $n(z)$;
- самоузгоджений потенціал $V_s(z)$;
- локальна густина електронних станів $g(E_z, z)$;
- локальна функція розподілу $N(E_z, z)$;
- коефіцієнт передачі за поперечною енергією $T(E_z)$;
- густина струму РТД $J(V)$.

7.3.1. Концентрація та хвильові функції

Для знаходження концентрації електронів область, яка моделюється, поділяється на квантову та класичну, тобто «пристрій» та «резервуари» (рис. 7.14, а).

До квантової області належать ДБКС та спейсери. До класичної області належить ділянка високолегованих областей такої довжини, яка потрібна для того, щоб на її краях концентрація та потенціал вирівнювалися до своїх рівноважних значень з потрібною точністю. На практиці такі ділянки обираються довжиною десятки нанометрів.

На рис. 7.14, б квантовій області відповідає область $z \in [z_0; z_5]$, де $z_0 = (i_0 - 1)\Delta$, $z_5 = (i_5 - 1)\Delta$; Δ – крок дискретної сітки. Області

$z \in [0; z_0]$ та $z \in [z_5; L]$ належать до лівого та правого резервуарів відповідно.

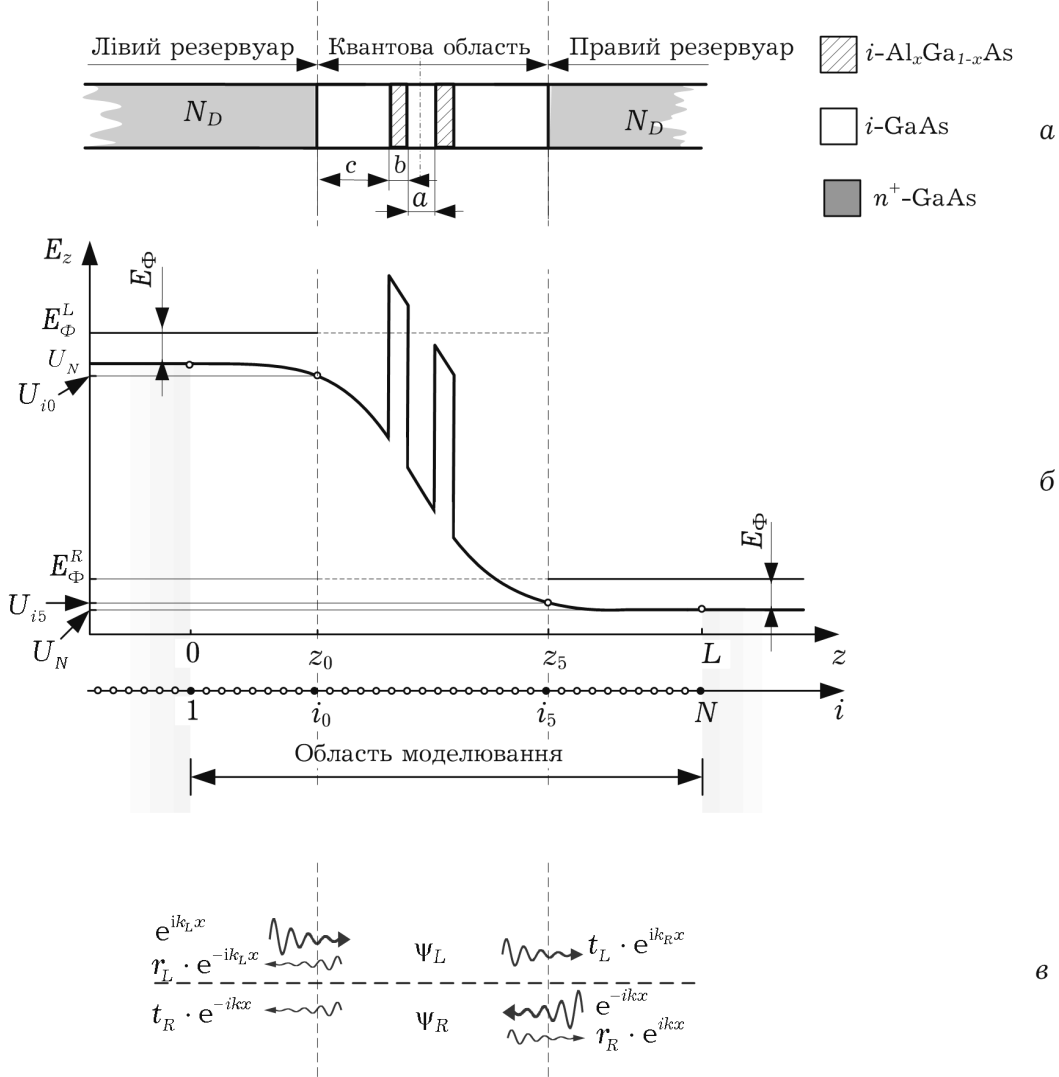


Рис. 7.14. Припущення та позначення, прийняті для моделювання:
 поділ на три області (а); дискретизація та умовні позначення (б);
 хвильові функції в області моделювання (в)

Вважається, що електронний газ у всьому *лівому резервуарі* підпорядковується статистиці Фермі-Дірака з параметром

$$E_\Phi^L = U(0) + E_\Phi = U_1 + E_\Phi,$$

у правому з параметром

$$E_\Phi^R = U(L) + E_\Phi = U_N + E_\Phi,$$

де $U = E_c + U_s$, тобто сума потенціальної енергії електрона в кристалічній ґратці E_c та самоузгодженого потенціалу $U_s = -eV_s$;

L – довжина ділянки, що моделюється; $U_i = (i - 1)\Delta$; E_Φ – відрахований від дна зони провідності рівень Фермі електронів у високолегованих областях. Він визначається як корінь рівняння

$$N_D^+ = 4\pi \left(\frac{2m_c^*}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E}}{1 + \exp(E - E_\Phi) / k_B T} dE,$$

де N_D^+ – концентрація іонізованих домішок.

Профіль дна зони провідності у класичних областях $U(z)$ знаходять з рівняння Пуассона для всієї ділянки, що моделюється. Він визначає густину станів тривимірного електронного газу для класичних ділянок. У довільній точці i (якій відповідає координата $z_i = \Delta(i - 1)$) лівої чи правої класичної області

$$g_i(E) = 4\pi \left(\frac{2m_i^*}{h^2} \right)^{3/2} (E - U_i)^{1/2};$$

функція Фермі для лівого (правого) резервуара:

$$f_{L(R)}(E) = \frac{1}{1 + \exp(E - E_\Phi^{L(R)} / k_B T)} = \frac{1}{1 + \exp(E - (E_\Phi + U_{1(N)}) / k_B T)}.$$

Отже, концентрацію в i -й точці лівого (правого) резервуара можна знайти за формулою

$$n_i = 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{3/2} \int_{U_i}^\infty \frac{\sqrt{E - U_i}}{1 + \exp(E - (E_\Phi + U_{1(N)}) / k_B T)} dE. \quad (7.42)$$

Вважаючи, що електрони у квантову область потрапляють або з правого, або з лівого резервуарів і між собою не взаємодіють, та керуючись тими ж судженнями, що і в підрозд. 7.1.2, легко переконатись, що у загальному вигляді концентрацію електронів у неоднорідній області можна визначити, взявши потрійний інтеграл:

$$n = \int_{-\infty}^\infty |\psi(\mathbf{k})|^2 N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z, \quad (7.43)$$

який у випадку одновимірного квантового транспорту може бути зведений до двох звичайних інтегралів за поперечною енергією:

$$n = n_R + n_L. \quad (7.44)$$

Під час переходу від інтеграла (7.43) до (7.44) вважається, що:

1. Ймовірність заповнення електронних станів, тобто функція розподілу електронів за енергіями збігається з рівноважною у відповідному резервуарі, що помножена на відповідну ймовірність $|\psi(\mathbf{k})|^2$. Вище було припущено, що електрони в резервуарах підпорядковані рівноважній статистиці Фермі.

Відповідні рівні Фермі у квантових областях позначено на рис. 7.14, б пунктирними лініями, що стають суцільними в класичних областях, де енергія Фермі має безпосередній фізичний зміст.

2. Густина станів така сама, як і в граничних із квантовою областю точках, якими є $z_0 = (i_0 - 1)\Delta$ для електронів, що інжектуються з лівого резервуара, та $z_5 = (i_5 - 1)\Delta$ для електронів, що інжектуються з правого резервуара. Це одне з найменш обґрунтованих припущень для моделі.

Взяті для квантових областей початки відліку функції густини станів (тобто енергії, за яких густина станів дорівнює нулю) позначені на рис. 7.14, б пунктирними лініями. У класичних областях вони позначені суцільною лінією; поняття «густина станів» там має безпосередній зміст, чого не можна сказати про квантову область.

Доданки формули (7.44) отримано, виходячи з таких суджень.

Інтегрування проводиться за всіма значеннями проекцій k_x та k_y і за додатними (від'ємними) складовими k_z для «лівих» («правих») електронів:

$$n_{L(R)} = \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} |\psi_{L(R)}(E_z(k_z))|^2 dk_z \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\mathbf{k}) dk_x dk_y. \quad (7.45)$$

У формулі (7.45) $N(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})$, де $g(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^3$ – густина k -станів для тривимірного кристала; $f(\mathbf{k}, k_\Phi)$ – функція Фермі–Дірака, що визначається так:

$$f(\mathbf{k}, k_\Phi) = \frac{1}{1 + \exp\left((E(\mathbf{k}) - E_\Phi^{L(R)}(k_\Phi))/k_B T\right)} =$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{1 + \exp\left(\left\{(\hbar^2 / 2m^*)(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + U_{i0} - (U_1 + (\hbar^2 / 2m^*)k_\Phi^2)\right\} / k_B T\right)}, & k_z > 0; \\ \frac{1}{1 + \exp\left(\left\{(\hbar^2 / 2m^*)(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + U_{i5} - (U_N + (\hbar^2 / 2m^*)k_\Phi^2)\right\} / k_B T\right)}, & k_z < 0. \end{cases}$$

Остання рівність зумовлена тим, що закон дисперсії для електронів, що інжектуються з лівого (правого) резервуара¹⁷:

$$E(\mathbf{k}) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + U_{i0} = E_x + E_y + E_z, & k_z < 0 \text{ (з правого);} \\ \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + U_{i5} = E_x + E_y + E_z, & k_z < 0 \text{ (з лівого).} \end{cases}$$

Вважається, що $E_z = (\hbar^2 k_z^2 / 2m^*) + U_{i0(i5)}$, тобто поля, в яких перебуває електрон, змінюють лише z -складову його енергії¹⁸.

Рівень Фермі у лівому (правому) резервуарі (рис. 7.14, б):

$$E_\Phi^{L(R)} = U_{1(N)} + \frac{\hbar^2 k_\Phi^2}{2m^*} = U_{1(N)} + E_\Phi.$$

Підставляючи значення $g(\mathbf{k})$ та $f(\mathbf{k}, k_\Phi)$ у формулу (7.45) та проводячи інтегрування за двома поперечними проекціями \mathbf{k} , отримаємо формули для $n_{L(R)}$:

¹⁷ Цим ми прирівнюємо густину станів у квантовій області до густини станів у точці i_0 . Зрозуміло, що у квантовій області вже не можна говорити про густину електронних станів, оскільки це суперечить можливості тунелювання. Найбільш логічно припустити, що повна енергетична функція розподілу електронів $N(E)$ у квантовій області збігається з $N(E)$ у крайній точці i_0 (де електрони ще вважаються розподіленими рівноважно), помножена на відповідну ймовірність.

¹⁸ Таке припущення було зроблене для того, щоб забезпечити однаковий початок відліку енергії для лівого та правого резервуарів (у чисельних моделях $|\psi_L(E_z(k_z), z)|^2$ та $|\psi_R(E_z(k_z), z)|^2$ розраховуються в одному циклі).

$$n_{L(R)} = N'_c \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} \ln \left(1 + \exp - \frac{E_z - (E_{\Phi} + U_{1(N)})}{k_B T} \right) dE_z, \quad (7.46)$$

$$\text{де } N'_c = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3}.$$

Для отримання формули (7.46) використовувався метод інтегрування, аналогічний описаному в дод. Д7.1.

Підінтегральний вираз (7.46) має зміст повної функції розподілу електронів за z -складовою енергії у точці z :

$$N(E_z, z) = N'_c \frac{|\psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} \ln \left(1 + \exp \left(- \frac{E_z - (E_{\Phi} + U_{1(N)})}{k_B T} \right) \right). \quad (7.47)$$

Як видно з формули (7.47), функція $N(E_z, z)$ залежить від розподілу електронів у резервуарах. Відтак через експоненціальне зменшення заселеності резервуарів інформація про розподіл електронів на вищих рівнях у квантовій ямі втрачається. Щоб отримати інформацію про всі рівні енергії у квантовій ямі, а не лише про заселені, зручно користуватися лише частиною функції $N(E_z, z)$:

$$g(E_z, z) = N'_c \frac{|\psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}}, \quad (7.48)$$

яка має зміст, аналогічний функції густини станів у статистичній фізиці, але залежить від координати, тому $g(E_z, z)$ будемо називати *локальною густиною станів*.

У формулу для концентрації електронів (7.46) входять поки що невідомі хвильові функції електронів з правого (лівого) резервуара $\psi_{L(R)}(E_z(k_z), z)$. У чисельних моделях виникає необхідність дискретизації рівняння Шредінгера для обвідної хвильової функції електрона:

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi_{L(R)}(z)}{dz} + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(z)) \psi_{L(R)}(z) = 0. \quad (7.49)$$

Консервативна скінченно-різницева схема, отримана інтегро-інтерполяційним методом [200; 201] для внутрішніх точок сітки має такий вигляд (див. дод. Д7.2):

1) якщо точка i не лежить на межі двох матеріалів, $i \notin \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$\psi_{i+1} - 2 \left(1 - \frac{\Delta^2 m m_i}{\hbar^2} (E_z - U_i) \right) \psi_i + \psi_{i-1} = 0, \quad (7.50)$$

де m_i – відносна ефективна маса; m – маса спокою електрона.

2) якщо точка i збігається з гетеромежею, $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_5\}$:

$$\psi_{\Gamma, i+1} + \frac{m_{i+1}}{m_{i-1}} \psi_{\Gamma, i-1} - \left(1 + \frac{m_{i+1}}{m_{i-1}} - \frac{2\Delta^2 m_{i+1} m}{\hbar^2} (E_z - V_i) \right) \psi_i = 0. \quad (7.51)$$

Для зовнішніх точок, використовуючи загальні вимоги до хвильової функції та її похідної, можна отримати такі рівняння, що замикають кінцево-різницеві схеми для ψ_L та ψ_R (див. дод. Д7.3):

– для ψ_L ліворуч:

$$(ik_L \Delta - 1) \psi_1 + \psi_2 = 2ik_L \Delta; \quad (7.52)$$

– для ψ_L праворуч:

$$(ik_R \Delta - 1) \psi_N + \psi_{N-1} = 0; \quad (7.53)$$

– для ψ_R ліворуч:

$$(ik_L \Delta - 1) \psi_1 + \psi_2 = 0; \quad (7.54)$$

– для ψ_R праворуч:

$$(ik_R \Delta - 1) \psi_N + \psi_{N-1} = 2ik_R \Delta, \quad (7.55)$$

де $k_{L(R)} = \sqrt{2m^*(E_z - U_{i1(i5)})} / \hbar$, причому у рівняннях (7.52) та (7.53) під ψ слід розуміти ψ_L , а в (7.54) та (7.55) – ψ_R .

Рівняння (7.52)–(7.55) були отримані, вважаючи, що межа між квантовою областю та резервуарами не збігається з гетеромежею. Метод отримання цих рівнянь називають методом квантової передачі через межу (англ. *Quantum transmitting boundary method* [202]).

Рівняння (7.50)–(7.55) формують скінченно-різницеві схеми рівнянь Шредінгера для ψ_L та ψ_R для усіх N_k точок, на які розбита активна область $[z_0; z_5]$. Для їх розв'язання використовують метод Томаса [203].

7.3.2. Вплив просторового заряду

Врахувати міжелектронну взаємодію, не виходячи за межі одноелектронного наближення, можна завдяки припущенню про те, що кожний електрон рухається під дією поля, що його створює решта електронів та іонів (поле просторового заряду). Таке наближення називають наближенням Хартрі [22; 189]. Потенціал цього поля – самоузгоджений потенціал V_s – можна знайти з рівняння Пуассона:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_d^+(z)], \quad (7.56)$$

де ε – відносна діелектрична проникність; ε_0 – діелектрична стала; N_d^+ – концентрація іонізованих донорів.

Величини V_s та $n(z) = n_L(z) + n_R(z)$ невідомі апріорі. Однак відомо, що $n_{L(R)}(z)$ визначається формулами (7.46) та є функціями V_s :

$$U(z) = E_c(z) + U_s(z),$$

де $U_s(z)$ – потенціальна енергія електрона у полі кристалічної ґратки та просторового заряду, величина, яка дотепер вважалась даною, $U_s(z) = -eV_s$.

Таким чином, формули (7.42) (7.44) та (7.56) становлять систему інтегро-диференціальних рівнянь, яку необхідно розв'язати, щоб знайти самоузгоджений потенціал. Випишемо цю систему в такому вигляді, щоб був зрозумілим формально-математичний бік питання:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_d^+(z)]; \quad (7.57)$$

$$n(z) = \begin{cases} \sum_{i=L,R} \int |\psi_i(E_z(k_z), V_s, z)|^2 f_i(E_z) dE_z, & z \in [z_1, z_5]; \\ 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{3/2} \int_{U_i}^{\infty} \frac{\sqrt{E - U(z)}}{1 + \exp \frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T}} dE, & z \notin [z_1, z_5], \end{cases} \quad (7.58)$$

де $f_i(E_z) \equiv \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \frac{\ln \left(1 + \exp \left(- \frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T} \right) \right)}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}}$.

Оскільки вираз (7.58) залежить від V_s переважно через хвильові функції $\psi_{L(R)}$, які, у свою чергу, є розв'язками рівняння Шредінгера, рівняння (7.58) називають самоузгодженою системою Шредінгера–Пуассона.

Метод розв'язання системи Шредінгера–Пуассона полягає в тому, що спочатку задають початкове наближення для самоузгодженого потенціалу $V_s(z)$. За початкове наближення $V_s^{old}(z)$ краще взяти лінійну зміну потенціалу в квантовій області, а в резервуарах вважати потенціал незмінним:

$$V_s^{old}(z) = \begin{cases} 0, & z < z_1; \\ \frac{V}{L} z, & z \in [z_1, z_5]; \\ V, & z > z_5. \end{cases}$$

Це початкове наближення використовується для пошуку концентрації за всією довжиною модельної структури $n^{old}(z)$ згідно з виразом (7.58). Підставляючи знайдену функцію $n^{old}(z)$ у рівняння Пуассона (7.57), можна знайти наступне наближення до самоузгодженого потенціалу $V_s^{new}(z)$.

Найпростіший спосіб знайти самоузгоджений потенціал з абсолютною точністю ε_V – це організувати ітераційний процес так, щоб знайдене $V_s^{new}(z)$ використовувалося як наступне наближення для пошуку концентрації $n^{new}(z)$ і так далі – це метод простих ітерацій. Однак практика показує, що умова

$\max |V_s^{new}(z) - V_s^{old}(z)| < \varepsilon_V$ не виконується за будь-якої кількості ітерацій, тобто ітераційний процес не є збіжним. Тому альтернативно використовуються два методи [16]:

1. *Релаксаційний алгоритм.* Він полягає в тому, щоб для пошуку $n^{new}(z)$ використовувати не безпосередньо нове наближення V_s^{new} , а величину, яка обчислюється за формулою

$$V_s^{new'} = V_s^{old} + \alpha(V_s^{new} - V_s^{old}), \quad (7.59)$$

що зводиться до методу простих ітерацій, якщо $\alpha = 1$. Однак за $\alpha \ll 1$ (7.59) позбавляється нестійкості, що властива попередньому методу. Типові значення α становлять 0,01 та менше; за цих умов метод зазвичай впевнено, однак дуже повільно, збігається.

2. *Метод Гумеля.* Ідея прискорених методів самоузгодження ґрунтується на врахуванні характеру залежності концентрації від самоузгодженого потенціалу. Якщо вважати, що електронний газ в області моделювання невідроджений та перебуває в локальній рівновазі [204], то концентрація може бути віднайдена за формулою

$$n(z) = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c(z) + eV_s(z)}{k_B T}\right) = n_0 \exp\left(\frac{eV_s}{k_B T}\right).$$

Для V_s^{old} отримаємо: $n^{old}(z) = n_0 \exp(eV_s^{old} / k_B T)$.

Для V_s^{new} : $n^{new}(z) = n_0 \exp(eV_s^{new} / k_B T)$.

Якби існувала локальна рівновага та невідродженість, то нові та старі наближення пов'язувалися б між собою співвідношенням

$$n^{new}(z) = n^{old}(z) \exp\left(\frac{e(V_s^{new} - V_s^{old})}{k_B T}\right), \quad (7.60)$$

що безпосередньо впливає з двох попередніх формул. У випадку, коли вказані умови не виконуються, вираз (7.60) є хорошим наближенням для концентрації n^{old} , оскільки враховує її нелінійну залежність від потенціалу. Метод Гумеля [205]

полягає в тому, щоб знаходити нові наближення для потенціалу з рівняння

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s^{new}}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n^{old}(z) \exp\left(\frac{V_s^{new} - V_s^{old}}{V^{ref}}\right) - N_d^+(z) \right], \quad (7.61)$$

де V^{ref} називають опорним потенціалом (англ. *reference potential*), який по суті є тепловим, $V^{ref} = k_B T / e$.

Рівняння (7.61) нелінійне відносно V_s^{new} , тому кінцево-різницева схема, що йому відповідає, складатиметься з нелінійних рівнянь, які можуть бути розв'язані, наприклад, методом Ньютона.

З погляду економії чисельних ресурсів більш привабливим є лінеаризований метод Гумеля, який можна отримати з рівняння (7.61), розклавши $\exp(e(V_s^{new} - V_s^{old}) / k_B T)$ в ряд Маклорена та обмежившись першими двома членами: $\exp(x) \approx 1 + x$. Результат має такий вигляд:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s^{new}}{dz} - n^{old}(z) \frac{e}{\varepsilon_0} \frac{V_s^{new}}{V^{ref}} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n^{old}(z) \left(1 - \frac{V_s^{old}}{V^{ref}} \right) - N_d^+(z) \right]. \quad (7.62)$$

Рівнянню (7.62), на відміну від (7.61), буде відповідати скінченно-різницева схема, що складається з лінійних алгебричних рівнянь. Спосіб їх отримання цілком аналогічний раніше застосованому до рівняння Шредінгера (7.49) (див. дод. Д7.2), оскільки математично (7.62) та (7.49) – одне й те саме рівняння.

Запишемо скінченно-різницеву схему, що відповідає рівнянню (7.62) в i -й точці дискретної сітки, у вигляді

$$a_i V_{i-1} + b_i V_i + c_i V_{i+1} = d_i. \quad (7.63)$$

Тут і далі, щоб не ускладнювати сприйняття, замість V_s вживається просто V . Для коефіцієнтів рівняння (7.63) можна отримати такі формули (II порядок точності):

1. Для всіх внутрішніх точок, що не є гетеромежами, $i \notin \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$a_i = c_i = 1; \quad (7.64)$$

$$b_i = -2 - \frac{1}{\varepsilon_i} \Delta^2 \frac{en_i^{old}}{\varepsilon_0 V^{ref}}; \quad (7.65)$$

$$d_i = \frac{\Delta^2}{\varepsilon_i} \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_i^{old} \left(1 - \frac{V_i^{old}}{V_i^{ref}} \right) - N_i^+ \right]. \quad (7.66)$$

2. Для всіх гетеромеж з $i \in \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$a_i = 1; \quad (7.67)$$

$$b_i = -1 - \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_{i+1}} - \frac{1}{\varepsilon_{i+1}} \Delta^2 \frac{en_i^{old}}{\varepsilon_0 V^{ref}}; \quad (7.68)$$

$$c_i = \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_{i+1}}; \quad (7.69)$$

$$d_i = \frac{\Delta^2}{\varepsilon_{i+1}} \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_i^{old} \left(1 - \frac{V_i^{old}}{V_i^{ref}} \right) - N_i^+ \right]. \quad (7.70)$$

Зовнішні точки обираються настільки далеко від активної частини пристрою, що електричного поля в них немає: $dV_s/dz = 0$, звідки отримуємо умови Діріхле:

$$V_1 = 0; V_N = V. \quad (7.71)$$

Рівняння (7.63)–(7.71) формують скінченно-різницеву схему, що відповідає рівнянню (7.62). Самоузгоджений потенціал вважається знайденим з точністю ε_V , якщо виконується умова $\max |V_s^{new}(z) - V_s^{old}(z)| < \varepsilon_V$.

Розподіл концентрації та потенціального рельєфу в модельному діоді (рис. 7.6), що отримані в результаті самоузгодженого розв'язання системи Шредінгера–Пуассона, наведено на рис. 7.15. З рисунка видно, що зі зростанням напруги накопичення заряду в області лівого спейсера та квантової ями збільшується. Також зрозумілим є вплив перерозподілу заряду на розраховані характеристики: увесь потенціальний рельєф квантової області «піднімається» по осі енергії, чим уповільнює досягнення пікової напруги.

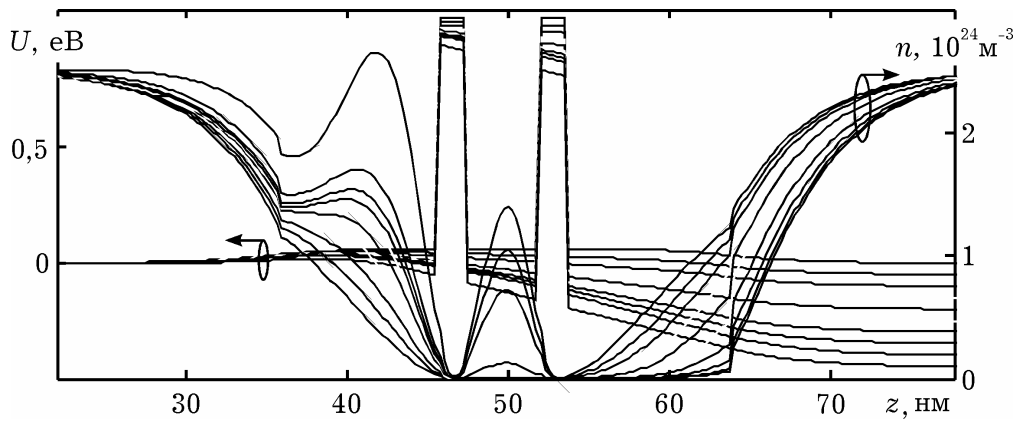


Рис. 7.15. Розподіли концентрації та потенціальної енергії електронів у модельному РТД (рис. 7.6), розраховані самоузгоджено для напруг від 0 до 0,45 В

Визначною особливістю чисельного моделювання є можливість пояснення природи квантово-розмірних ефектів у активній частині РТД за допомогою аналізу розподілу концентрації $n(z)$, локальної густини станів $g(E_z, z)$ та функції розподілу $N(E_z, z)$. Густину станів як функцію двох аргументів зображено на рис. 7.16, а за допомогою градацій сірого. Темні горизонтальні смуги на характеристиці $g(E_z, z)$ відповідають метастабільним рівням енергії у квантові ямі, характерна інтерференційна картина розподілу густини станів у спейсерах вказує на проявлення хвильової природи електрона. Густина станів на першому метастабільному рівні має максимум по центру квантової ями, на другому – два симетричні максимума, на третьому рівні, який частково міститься над потенціальними бар'єрами – три. Природу такого розподілу $g(z)$ на i -му рівні в ямі можна пояснити в межах теорії збурень. Справді, кількість максимумів $g(z)$ на i -му рівні має бути такою ж, як у $|\psi_i(z)|^2$ для незбуреної системи, тобто дорівнювати номеру рівня. Спостерігається також розширення рівнів зі зростанням енергії, що пояснюється зменшенням часу життя електрона на вищих рівнях.

З рис. 7.16, б видно, що накопичення заряду в ямі відбувається лише на найнижчому рівні. Цей факт пояснює, чому концентрація за малих зміщень має максимум у центрі квантової ями (рис. 7.15).

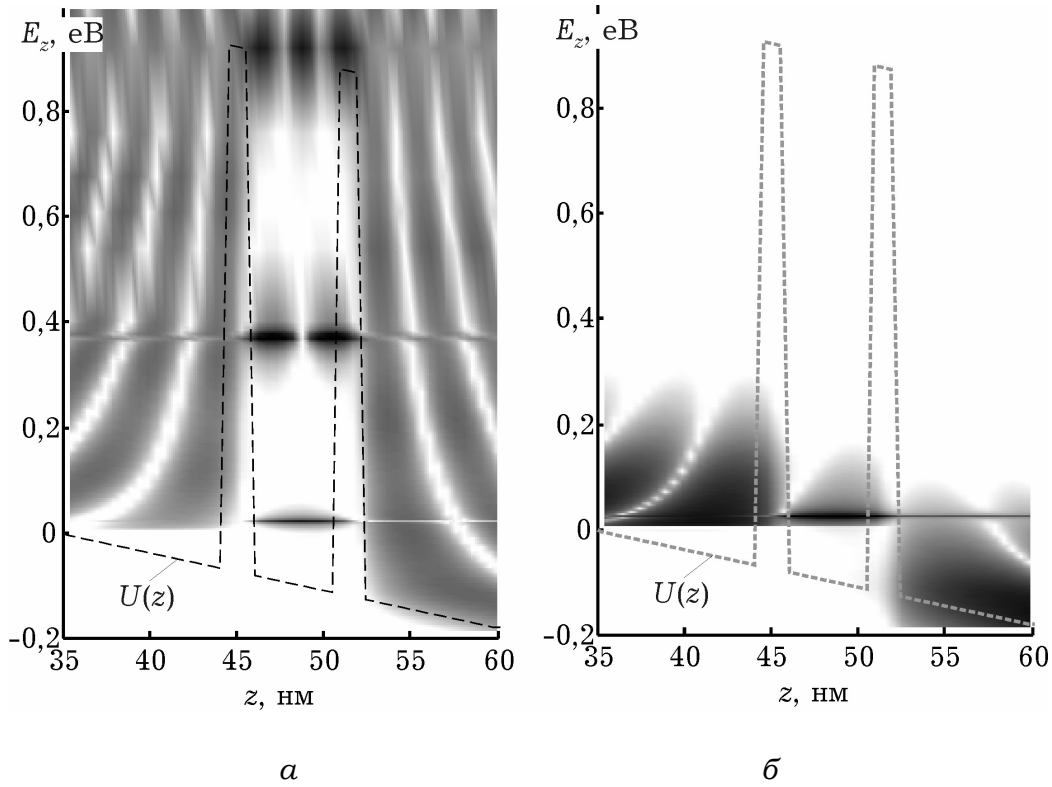


Рис. 7.16. Локальна густина станів (а) та функція розподілу електронів у квантовій області РТД (б). Прикладена напруга $V = 0,2$ В. Темнішому кольору відповідає більше значення функцій у логарифмічному масштабі. Штриховою лінією позначено потенціальний рельєф

7.3.3. Узагальнена формула Цу–Есакі

Густина струму через РТД може бути розрахована відповідно до звичайних правил розрахунку середніх значень фізичних величин у статистичній фізиці:

$$\mathbf{J} = e \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v}(\mathbf{k}, z) N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z, \quad (7.72)$$

вважаючи, що функція розподілу електронів у квантовій області

$$N(\mathbf{k}, z) \equiv \begin{cases} N_L(\mathbf{k}) \cdot |\psi_L(\mathbf{k}, z)|^2, & \text{якщо } k_z > 0; \\ N_R(\mathbf{k}) \cdot |\psi_R(\mathbf{k}, z)|^2, & \text{якщо } k_z < 0, \end{cases} \quad (7.73)$$

де $\mathbf{v}(\mathbf{k}, z)$ – середня швидкість електрона в точці z , що визначається як густина потоку ймовірності, поділена на саму густину ймовірності [181]:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}, z) = \frac{\mathbf{j}(\mathbf{k}, z)}{|\psi(\mathbf{k}, z)|^2} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi}{|\psi(\mathbf{k}, z)|^2}. \quad (7.74)$$

З урахуванням того, що струм протікає вздовж осі $0z$, для різних знаків z -проекцій хвильового вектора єдину ненульову проекцію струму $j_z(k_z, z) \equiv j$ запишемо:

$$j(k_z) \equiv \begin{cases} j_{12} = \frac{i\hbar}{2m^*} \left(\psi_L \frac{d\psi_L^*}{dz} - \psi_L^* \frac{d\psi_L}{dz} \right), & \text{якщо } k_z > 0; \\ j_{21} = \frac{i\hbar}{2m^*} \left(\psi_R \frac{d\psi_R^*}{dz} - \psi_R^* \frac{d\psi_R}{dz} \right), & \text{якщо } k_z < 0. \end{cases} \quad (7.75)$$

Враховуючи вирази (7.73) та (7.74), надамо виразу (7.72) вигляду

$$J(z) = J_{12} + J_{21}, \quad (7.76)$$

$$\text{де } J_{12(21)} \equiv e \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} j_{12(21)}(k_z, z) N_{L(R)}(k) dk_z dk_x dk_y.$$

Провівши інтегрування за позовжніми проекціями хвильових чисел k_x та k_y , а також замінивши інтегрування за k_z на інтегрування за E_z , отримаємо:

$$J_{12} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^{\infty} \frac{j_{12}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln \left(1 + e^{\frac{E_z - (E_F + U_1)}{k_B T}} \right) dE_z; \quad (7.77)$$

$$J_{21} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} \frac{j_{21}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln \left(1 + e^{\frac{E_z - (E_F + U_N)}{k_B T}} \right) dE_z. \quad (7.78)$$

Унаслідок виконання закону збереження заряду в квантовій механіці

$$\frac{\partial e|\psi|^2}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{j}(k_z, z)) = 0,$$

виконується також і закон збереження заряду в класичній електродинаміці, бо він є усередненням першого за всім ансамблем:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0. \quad (7.79)$$

Для стаціонарних процесів та транспорту вздовж осі $0z$ рівняння (7.79) зводиться до рівняння $dJ/dz = 0$. Цим підтверджується, що вирази (7.77) та (7.78) забезпечують виконання законів збереження в будь-якій точці структури.

Покажемо, як з виразів (7.77) та (7.78) випливає звичайна формула Цу–Есакі. Для цього знайдемо j_{12} у точці $z = z_5$ та j_{21} у точці $z = z_0$. Зазначимо, що для $z \geq z_5$ $\psi_L = t_L \exp(ik_R z)$, а для $z \leq z_1$ $\psi_R = t_R \exp(ik_L z)$. Із системи (7.75) маємо:

$$j_{12}(z_5) = \frac{\hbar k_R}{m^*} |t_L|^2; \quad (7.80)$$

$$j_{21}(z_0) = -\frac{\hbar k_L}{m^*} |t_R|^2. \quad (7.81)$$

Оскільки у виразах (7.77) та (7.78) $1/\sqrt{E_z - U_{i0(5)}} = \sqrt{2m^*}/\hbar k_{L(R)}$, то з урахуванням формул (7.80) та (7.81)

$$\frac{j_{12(21)}}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} = \pm \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m^*}} \frac{k_{R(L)}}{k_{L(R)}} |t_{L(R)}|^2 = \pm \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m^*}} T(E_z), \quad (7.82)$$

де $T(E_z) \equiv \frac{k_{L(R)}}{k_{R(L)}} |t_{R(L)}|^2$ – коефіцієнт проходження.

Підставляючи формулу (7.82) до (7.77) та (7.78) і додаючи отримані вирази згідно з формулою (7.76), матимемо формулу Цу–Есакі:

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\max(U_{i5}, U_{i0})}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z,$$

$$\text{де } D(E) \equiv \ln \left(\left\{ 1 + e^{-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}} \right\} / \left\{ 1 + e^{-\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T}} \right\} \right).$$

Для обчислення краще за все скористатися тим, що $|t_L(E_z)|^2 = |\psi_N|^2$.

Підінтегральний вираз у формулі Цу–Есакі має дуже різкий резонансний характер за рахунок функції $T(E_z)$, тому інтегрування звичайними чисельними методами вкрай неефективне. Відтак слід використовувати методи з адаптивним підбором кроку, наприклад алгоритм Сімпсона (у *MatLab* реалізується функцією *quad*). Графік функції $T(E_z)$ в «адаптивних» точках зображено на рис. 7.17.

Вольт-амперну характеристику модельного РТД зображено на рис. 7.18. Орієнтовний час розрахунку 100 точок ВАХ у *MatLab* без самоузгодження становить 90 с, із самоузгодженням – 3000 с.

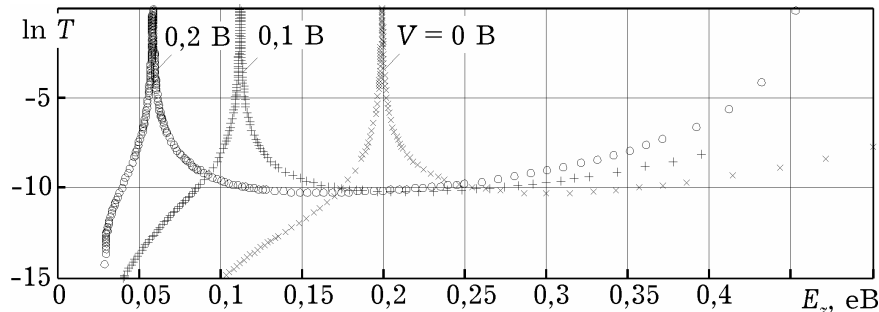


Рис. 7.17. Коефіцієнт проходження через квантову систему в релевантних для розрахунку ВАХ точках

Користуючись формулою Цу–Есакі, були розраховані ВАХ модельного РТД для випадків: а) напруга на активній області падає лінійно; б) потенціальний рельєф розраховано самоузгоджено. Результати подано на рис. 7.18.

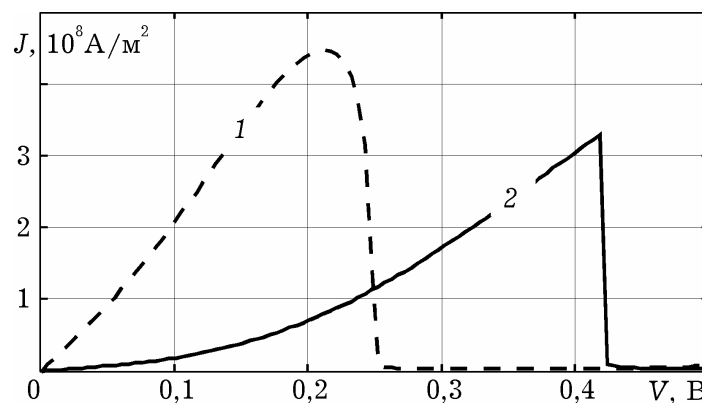


Рис. 7.18. Вольт-амперні характеристики модельного РТД:
1 – розрахована у припущенні лінійного спаду напруги;
2 – розрахована із залученням методу Хартрі

Як бачимо, врахування просторового заряду призводить до збільшення пікової напруги та зменшення пікового струму. Це пояснюється накопиченням від'ємного просторового заряду в спейсерах та квантовій ямі, що збільшує потенціальну енергію електрона, тим самим «піднімаючи» всі енергетичні рівні у квантовій ямі, а це зміщує умову резонансу в бік більш високих напруг.

7.3.4. Розсіювання у квантовій ямі резонансно-тунельного діода

Уявлення про електронний транспорт у квантовій області, що описані в поточному розділі, інколи класифікуються як «динамічна модель» [206; 207], щоб відрізнити від «кінетичних» [206; 208], тобто таких, що ґрунтуються та виводяться з положень квантової кінетики. Справді, в активній області розглядається рух кожного окремого електрона у полі, що зумовлене полем самої кристалічної ґратки та просторового заряду. Це задача на рух окремої частинки, і належить вона до динаміки, яка є розділом квантової механіки, при цьому явища, які зумовлені якісними відмінностями між поведінкою окремого електрона та великого електронного ансамблю, що є предметом кінетики, не розглядаються.

З окреслених причин урахування процесів розсіювання у розробленій моделі є чимось не зовсім природним (оскільки виходить за межі динаміки), за що такі моделі піддаються справедливій критиці [209; 210]. Однак концептуальна простота моделі робить привабливим включення розсіювання до розгляду у феноменологічний, і, можна сказати, трохи протиприродний спосіб. Опишемо один із таких підходів.

Якщо невелика частина електронів зазнає розсіювання за час перебування у квантовій області, то можна розділити струм J , що протікає через вказану область, на струм електронів, які не зазнали розсіювання («когерентну» складову J_{coh}), та струм електронів, що таких зіткнень зазнали («некогерентну» складову J_{incoh}):

$$J = J_{coh} + J_{incoh}. \quad (7.83)$$

Електрон, що зазнав розсіювання, виходить з когерентного каналу та поповнює послідовний канал. Але як відобразити в межах прийнятих уявлень процеси такого переходу?

Для відповіді на це запитання згадаємо, що ермітовість¹⁹ оператора Гамільтона забезпечує виконання закону збереження потоку густини ймовірності та закону неперервності заряду (7.79).

¹⁹ З погляду математики квантова механіка – це алгебра самоспряжених лінійних («ермітових») операторів.

Суть переходу з когерентного у послідовний канал полягає в тому, що когерентна складова струму має зменшуватися в напрямку протікання струму. Якщо струм протікає у додатному напрямку осі $0z$, то має бути

$$\frac{dJ_{coh}}{dz} < 0. \quad (7.84)$$

Враховуючи вирази (7.77) та (7.78), для виконання умови (7.84) необхідно, щоб:

$$\begin{aligned} \frac{dj_{12}}{dz} &< 0; \\ \frac{dj_{12}}{dj_{21}} &> 0, \end{aligned}$$

що можливо лише, якщо оператор Гамільтона не є ермітовим.

Зробити з ермітового оператора неермітовий дуже просто: достатньо ввести до нього уявну величину – уявний потенціал $(-iW)$. Тоді оператор Гамільтона з рівняння Шредінгера (7.49) набуде вигляду

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + U(z) - iW.$$

Для з'ясування змісту введеної величини $-iW$, яку називають оптичним потенціалом²⁰, розглянемо максимально просту задачу, а саме випадок вільного електрона: $U(z) = U = \text{const}$. Оскільки будь-який потенціальний рельєф можна описати кусково-сталими функціями, то отримані результати можна вважати універсальними та застосовними до довільної форми $U(z)$.

Розв'язком рівняння Шредінгера в означеному випадку є суперпозиція плоских хвиль:

$$\psi(z) = \underbrace{A \exp\{i\gamma z\}}_{\psi_{\rightarrow}} + \underbrace{B \exp\{-i\gamma z\}}_{\psi_{\leftarrow}},$$

де $\pm\gamma \equiv \pm(k + i\alpha) = \sqrt{2m^*(E - U + iW) / \hbar}$, тобто k – це дійсна частина хвильового вектора; α – уявна частина. Для електрона,

²⁰ Така назва зумовлена областю науки, в якій було введено аналогічний прийом для врахування поглинання світла; пізніше цей прийом був використаний Фешбахом, Портером та Вайскопфом для описання процесів розсіювання під час перебігу ядерних реакцій.

що рухається в додатному напрямку осі $0z$, $\psi_{\rightarrow} = A \exp\{i\gamma z\}$ – це хвиля, що відповідає падаючому електрону, $\psi_{\rightarrow} = B \exp\{-i\gamma z\}$ – це хвиля, що відповідає електрону, який зазнав відбиття.

Прості обчислення дають такий вираз для густини ймовірності у падаючій $\psi_{\rightarrow}(z)$ та відбитій $\psi_{\leftarrow}(z)$ хвилях, а також у хвильовій функції $\psi(z)$:

$$j_{\rightarrow} = \frac{\hbar |A|^2}{m^*} e^{-2\alpha z}; \quad j_{\leftarrow} = \frac{\hbar |B|^2}{m^*} e^{+2\alpha z};$$

$$j = \frac{\hbar}{m^*} \left\{ |A|^2 e^{-2\alpha z} + |B|^2 e^{+2\alpha z} \right\}.$$

Елементарний електричний струм, що його створює падаючий та відбитий електрони в напрямку руху відповідної частинки, зменшуються, що засвідчують знаки відповідних похідних:

$$\frac{dj_{\rightarrow}}{dz} = -2\alpha j_{\rightarrow}; \quad \frac{dj_{\leftarrow}}{dz} = +2\alpha j_{\leftarrow}.$$

Отже, отримано бажаний характер просторової залежності струму (див. умову (7.84)). Зазначимо, що на відстані $L = 1/(2\alpha)$ елементарний струм, що створює падаюча та відбита частинки, зменшується в $e \approx 2,7$ рази. Цю відстань можна охарактеризувати як довжину релаксації фази.

Уявна частина хвильового вектора

$$\alpha(W) = \sqrt[4]{a^2 + b^2} \sin\left(\frac{\text{Arcsin}(b / \sqrt{a^2 + b^2})}{2}\right),$$

де $a = \sqrt{2m^*(E_z - U)} / \hbar$; $b = \sqrt{2m^*W} / \hbar$, монотонно зростає зі зростанням оптичного потенціалу W , що впливає з наведеної формули.

Метод розрахунку W ґрунтується на тому, що цей оптичний потенціал зіставляють з деяким характерним часом (найчастіше – часом релаксації імпульсу) за формулою $W = \hbar / 2\tau_p$. Таким чином, зі збільшенням швидкості розсіювання $v \equiv 1 / \tau_p$ оптичний потенціал також зростає, що зменшує довжину L , тобто підвищується інтенсивність процесів переходу електронів з когерентного каналу в некогерентний.

Для оцінювання часу релаксації імпульсу електрона в активній області пристрою з поперечним транспортом можна використувати час релаксації імпульсу в тривимірному напівпровіднику.

Отже, введення в гамільтоніан оптичного потенціалу iW дозволяє моделювати процеси зменшення когерентної складової електричного струму в міру руху електронів від одного електрода до іншого. Однак це порушує закон неперервності заряду, якщо вважати, що когерентний канал – єдиний канал перенесення. Тому вводять уже згаданий некогерентний канал, густина струму в якому позначена через J_{incoh} (7.83). Закон збереження струму вимагає виконання рівності $j = j_{coh}(z) + j_{incoh}(z)$ у кожній точці пристрою, де j – елементарний струм, що його створює один електрон. Однак знайти спосіб знаходження $j_{incoh}(z)$, який би задовольняв цю умову, поки що не вдалося²¹. Натомість склався підхід, що ґрунтується на моделі одиничного розсіювача [211], який згодом був розвинений у роботах [212; 213; 180]. Згідно з цим підходом під час розрахунку струму вважається, що в ямі РТД міститься єдиний центр розсіювання, під час проходження якого частка когерентного струму стрибкоподібно зменшується на величину A :

$$A = 1 - T_{coh} - R_{coh},$$

де R_{coh} – коефіцієнт відбивання від квантової системи. Зауважимо, що якщо $W \neq 0$, то $T_{coh} < 1 - R_{coh}$, що завжди справджується для дисипативних систем; натомість, якщо розсіювання немає ($W = 0$), то $T_{coh} = 1 - R_{coh}$ і $A = 0$, що справедливо для систем без втрат.

Вважають, що кожний електрон, який зазнав розсіювання, буде певний час рухатися у квантовій ямі, доки не вийде через один із бар'єрів. Імовірність його виходу через правий бар'єр становить $T_R/(T_L + T_R)$, де $T_{R(L)}$ – коефіцієнт проходження правого (лівого) бар'єра. Положення центру розсіювання найчастіше вибирають посередині квантової ями –

²¹ Цей факт в більшості робіт, які використовують модель оптичного потенціалу, замовчується, що можна розцінювати як порушення наукової етики.

ця точка розділяє квантову систему на ліву та праву частини. Коефіцієнти проходження $T_{R(L)}$ є коефіцієнтами проходження лівої та правої систем окремо, спосіб знаходження цих коефіцієнтів не відрізняється від описаних.

Отже, ймовірність для електрона, що емітував з лівого резервуара, досягти правого за умови розсіювання в некогерентний канал $A T_R / (T_L + T_R) \equiv T_{incoh}^{22}$. Ймовірність того, що електрон досягне правого резервуара через когерентний канал, становить T_{coh} . Оскільки ці дві події взаємовиключні, то ймовірність досягнути правого резервуара будь-яким із двох способів визначається виразом

$$T(E_z) = T_{coh} + (1 - R_{coh} - T_{coh}) \frac{T_R}{T_R + T_L}.$$

Ще раз зазначимо, що такий спосіб урахування розсіювання порушує фізичність моделі, а саме не забезпечує виконання закону неперервності повного струму (7.79) по всій довжині квантової області. Його використання пояснюється простотою, однак не відрізняється високою адекватністю, тому час розсіювання τ_p зазвичай відіграє роль припасувального параметра.

Залежність сумарного коефіцієнта передачі $T(E_z)$ та його складових – імовірності когерентного $T_{coh}(E_z)$ та некогерентного $T_{incoh}(E_z)$ проходження – зображено на рис. 7.19, а. Час релаксації τ розраховувався за формулою [180]:

$$\frac{1}{\tau} = S_{op} \left[1 + \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{op} / k_B T) - 1} \right],$$

де $\hbar\omega_{op}$ – енергія полярних оптичних фононів у GaAs; $\hbar\omega_{op} = 0,036$ eV; S_{op} – швидкість розсіювання, $S_{op} = 36 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$.

Помітно, що функція $T(E_z)$ у цілому розмивається. Це вказує на те, що розсіювання розширює спектр електронів, які можуть пройти крізь ДБКС.

²² Ймовірність події «А» за умови події «Б» $p_{A|B}$ дорівнює добутку відповідних безумовних ймовірностей: $p_{A|B} = p_A p_B$, що й було використано.

Урахування розсіювання приводить до очікуваної зміни форми ВАХ. Вольт-амперну характеристику, яка визначена з урахуванням розсіювання (параметри якого вказано вище) зображено на рис. 7.19, б. Помітно, що розсіювання призводить до зростання струму приблизно на порядок та зростання пікового струму на 20 %. Крім того, зменшується від'ємна диференціальна провідність. Ці зміни пояснюються появою нового каналу передачі з ширшою спектральною смугою.

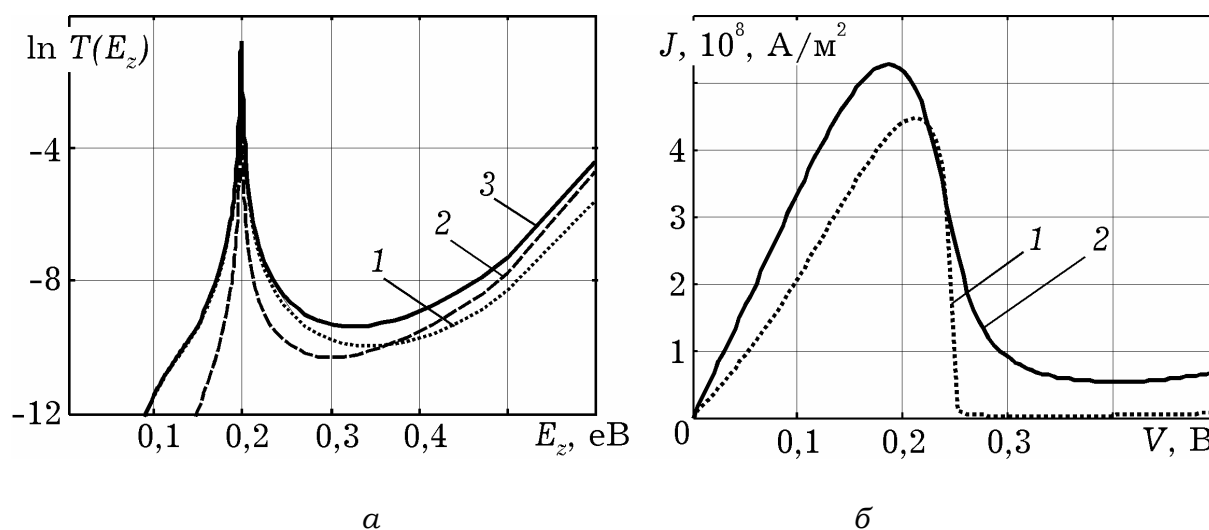


Рис. 7.19. Вплив розсіювання на характеристики РТД:
 а – коефіцієнти проходження ($V = 0$): 1 – T_{incoh} ; 2 – T_{coh} ;
 (3 – $T \equiv T_{incoh} + T_{coh}$; б – ВАХ без (1) з урахуванням розсіювання (2)
 (моделювання проводилося несамоузгоджено)

Слід зазначити, що збіжність лінеаризованого методу Гумеля з пошуку самоузгодженого потенціалу значно уповільнюється в області від'ємної диференціальної провідності порівняно з областями додатної диференціальної провідності. Для досягнення точності 10^{-4} еВ в області від'ємної диференціальної провідності потрібно в середньому 30 ітерацій, тоді як в області додатної диференціальної провідності середня кількість таких ітерацій становить 10. При цьому, якщо не зменшити абсолютної похибки обчислення інтеграла концентрації до 10^{17} м⁻³, алгоритм Гумеля взагалі може не зійтися, до того ж одні й ті самі наближення самоузгодженого потенціалу повторюються через одну (іноді дві-три) ітерації, так і не досягаючи

заданої точності. Це означає, що незначні зміни концентрації електронів у активній області РТД приводять до значних змін самоузгодженого потенціалу, який визначає струм. Звідси можна зробити висновок, що в перехідних процесах, де розподіл об'ємного заряду в часі змінюється, область від'ємної диференціальної провідності буде областю нестабільності, оскільки за однієї і тієї самої напруги за майже однакових концентрацій струм може сильно різнитися. Описане явище справді спостерігається на практиці [214].

7.3.5. Вплив вторинних факторів на характеристики резонансно-тунельного діода

Опір приконтактних областей. Під час розгляду процесів у квантовій області достатньо обґрунтованим є припущення про те, що високолеговані приконтактні та контактні області ідеально провідні. Однак навіть поверхневий аналіз експериментальних ВАХ резонансно-тунельних діодів засвідчує, що опір пасивних областей РТД, зокрема опір високолегованих шарів та контактів, суттєво впливає на вигляд ВАХ. Зокрема, пік струму на експериментальних ВАХ спостерігається за значно вищих значень напруги, ніж це допускає будь-яке оцінювання, здійснене з нехтуванням впливу вказаного фактора [215, 216]. Так, Цу зазначав [217], що перший пік ВАХ має спостерігатися за напруги $V = 2E_1/e$, де E_1 – положення першого метастабільного рівня у квантовій ямі. Застосовуючи цю наближену формулу до РТД, описаного в [216], яма та бар'єри якого виготовлено з шару GaAs шириною 45 Å та шарів AlAs шириною 17 Å відповідно, отримуємо оцінку пікової напруги $2E_1 \approx 0,3$ В, тоді як експериментальна ВАХ засвідчує наявність такого піку за напруги 2,5 В для однієї полярності напруги та близько 1 В – для іншої, що підтверджує тезу про необхідність врахування особливостей топології, які впливають на опір контактних та приконтактних шарів.

Оскільки опір самих контактів залежить від топології конкретного РТД, його слід розраховувати для кожного пристрою окремо. Уніфіковано можна спробувати описати лише приконтактні високолеговані області.

Зазвичай можна вважати, що високолеговані області мають таку ж площу, як і шари РТД. Нехай маємо всього M таких областей; для кожної i -ї області відомо її ширину (L_i) та концентрацію іонізованих донорів (N_i). Відповідний спад напруги

$$V_i = JR_{s,i},$$

де J – густина струму, що протікає через РТД; $R_{s,i}$ – погонний опір $R_{s,i} = \rho_i L_i$; ρ_i – питомий опір.

Питомий опір однорідного масивного напівпровідника може бути визначений за відомою формулою

$$\rho_i = (e\mu_i N_{d,i})^{-1},$$

де μ_i – рухливість електронів у i -му шарі. Скориставшись нею, отримаємо рівняння, за яким слід перераховувати теоретичні криві ВАХ для врахування впливу високолегованих областей:

$$V_\Sigma = V_{\text{DBQS}}(J) + J \sum_{i=1}^M R_s,$$

де V_Σ – напруга, яка вимірюється в експерименті; $V_{\text{DBQS}}(J)$ – розрахована ВАХ активної частини РТД. З цієї формули випливає, що зі збільшенням опору високолегованих областей пікова напруга зміщується в область більш високих напруг швидше, ніж напруга долини, що призводить до збільшення від'ємного диференціального опору. Це також може призвести до виникнення гістерезису, якщо величина паразитного опору перевищить певне значення. Гістерезис ВАХ справді спостерігається на практиці [218; 219], однак описаний механізм його формування не єдино можливий.

Вплив паразитних опорів на ВАХ РТД зображено на рис. 7.20. У разі поганої якості контактів опір паразитних

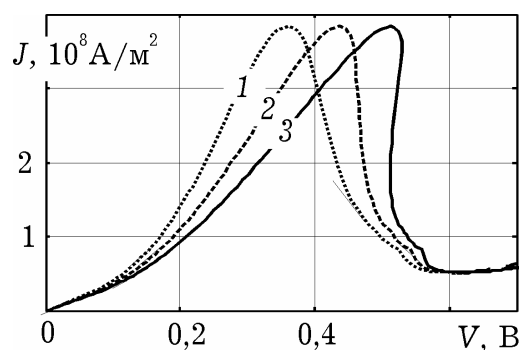


Рис. 7.20. Вплив величини погонного опору пасивних областей РТД R_s на ВАХ РТД:
1 – $R_s = 0$; 2 – $R_s = 40 \text{ Ом} \cdot \text{мкм}^2$;
3 – $R_s = 20 \text{ Ом} \cdot \text{мкм}^2$

областей може виявитися нелінійним, що, згідно з експериментальними даними, зафіксоване, наприклад, у роботах [215] та [216], в яких пікова напруга для РТД за однієї з полярностей напруги джерела живлення на 1,4 В перевищила вказану напругу за іншої полярності та досягала 2,5 В. При цьому характер залежності не може бути пояснений, якщо користуватися припущенням про лінійність опору контактних областей.

Форма розривів зон. Якщо потенціальна енергія електрона в зоні провідності зазнає стрибкоподібної зміни на гетеромежах, це призводить до формування прямокутних потенціальних ям та бар'єрів. Таке припущення є досить добре обґрунтованим, якщо розміри шарів значно більші за період кристалічної ґратки, однак ця умова не виконується для структур, що розглядаються.

Інший спосіб апроксимації розривів зон можна запропонувати, виходячи з результатів, отриманих у межах методу псевдопотенціалів [220], де було показано, що більш фізичною є двоступінчаста апроксимація. При цьому вважається, що потенціал змінюється різко, однак у два етапи (рис. 7.21, а). Така апроксимація, яку називають «надрешітковою», ймовірно є більш коректною, оскільки вона ґрунтується на більш адекватних методах розрахунку зонної структури, аніж в принципі дозволяє метод обвідної хвильових функцій.

Урахування реальної форми бар'єрів приводить до збільшення густини струму через РТД за рахунок підвищення проникності бар'єрів (рис. 7.21, б).

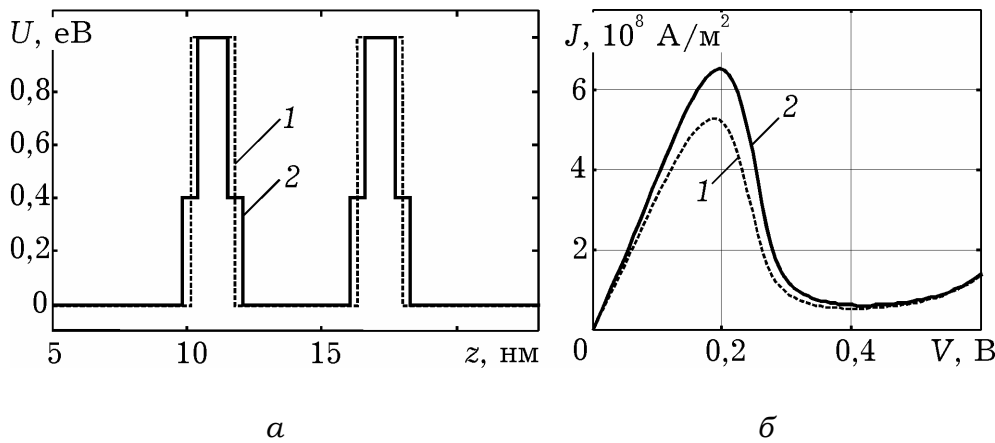


Рис. 7.21. Стандартна (1) та «надрешіткова» (2) моделі гетеромежі: профіль зони провідності в Γ -долині (а); результати моделювання ВАХ (б)

Точність та адекватність описаних моделей можна підвищити за рахунок реалізації таких кроків:

- для опису кінетики електронного колективу в резервуарах можна використовувати кінетичне рівняння Больцмана замість припущення про локальну рівновагу [221];
- врахувати непараболічність закону дисперсії [216];
- скасувати припущення про миттєву термалізацію електронів у резервуарах;
- врахувати струмоперенесення через метастабільні стани в емітерній квантовій ямі [222];
- якщо ефективні маси в емітері та квантовій ямі відрізняються (або якщо враховується непараболічність законів дисперсії), вираз для розрахунку струму не зводиться до формули Цу–Есакі; виникає необхідність проводити чисельне інтегрування також за складовою $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ [223] або ж використовувати наближені формули для густини струму [224], які враховують відмінність ефективних мас.

Окремо слід виділити способи підвищення адекватності, що ґрунтуються на врахуванні транспортування за участі вищих долин. У випадку, якщо напрямком росту гетероструктури є $[100]$, для GaAs-AlAs РТД релевантною буде Х-долина.

Таблиця 7.1

Параметри зонної структури переходу гетеропереходу AlAs/GaAs*

Розриви зон, еВ	Міждолинні відстані, еВ	
$\Delta E_{\Gamma} = 1$	GaAs	AlAs
$\Delta E_X = -0,24$	$E_{\text{GaAs}}^{\Gamma X} = 0,49$	$E_{\text{AlAs}}^{X\Gamma} = 0,73$
$\Delta E_L = 0,21$	$E_{\text{GaAs}}^{\Gamma L} = 0,29$	$E_{\text{AlAs}}^{XL} = 0,23$

*Дані взято з [225] та [226].

З рис. 2.11 та 2.14 видно, що на гетеромежах найбільш сприятливі умови створюються для переходу електронів з Γ -долини GaAs у X-долини AlAs, але не у всі, а лише у дві з них, що орієнтовані вздовж кристалографічного напрямку $[100]$ ²³. Перехід до X-долин, які орієнтовані в напрямках $[001]$ та $[010]$, мало ймовірний, оскільки розподіл електронів за імпульсами $\hbar k_{[001]}$ та $\hbar k_{[010]}$ залишається рівноважним (поздовжнього поля немає). З тих же причин невигідні також переходи до L-долин, що орієнтовані в напрямку $[111]$ та еквівалентних йому. Це підтверджується розрахунками в межах напівемпіричного методу сильного зв'язку [227] та свідчить на користь нехтування усіма міждолинними переходами, окрім Γ -X. Усі подальші викладки справедливі для гетероструктури з шарами AlAs-GaAs, що вирощена на підкладці з кристалографічною орієнтацією $[100]$.

Більшість припущень, прийнятих в однодолинній моделі, справедливі й для дводолинної моделі. Відмінність полягає у включенні до розгляду електронів із X-долини. Для спрощення вважається, що X-долини в резервуарах незаселені. Електрони з X-долини, що потрапляють у резервуари з квантової області, миттєво переходять у Γ -долину і термалізуються.

Вважаючи ψ^{Γ} та ψ^X відомими, побудуємо самоузгоджену модель, аналогічну описаній у розд. 7.3. Розподіл концентрації та струм через РТД змінюються з урахуванням можливості руху

²³ Кожна з цих X-долин лише наполовину перебуває в першій зоні Брілюена.

електронів у квантовій області як у Γ -, так і в X -долинах. Оскільки враховуються електрони з двох долин, то концентрація усіх електронів у квантовій області є сумою концентрацій електронів у Γ - та X -долинах (n^Γ та n^X відповідно), які знаходяться за формулами, що є простим узагальненням формул, отриманих для однодолинної моделі:

$$n = n^\Gamma + n^X,$$

де

$$n^{\Gamma(X)} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi^{\Gamma(X)}(\mathbf{k})|^2 N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z,$$

де $N(\mathbf{k}) = N^\Gamma(\mathbf{k}) + N^X(\mathbf{k})$; $N^{\Gamma(X)}$ – функція розподілу електронів у $\Gamma(X)$ долині лівого (якщо $k_z > 0$) або правого (якщо $k_z < 0$) резервуарів. Згідно з прийнятими припущеннями $N^X = 0$.

Формули для концентрації та струму в дводолинній моделі мають вигляд

$$n = n_L^\Gamma + n_R^\Gamma + n_L^X + n_R^X,$$

де:

$$n_{L(R)}^\Gamma = N'_c \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\psi_{L(R)}^\Gamma|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}^\Gamma}} \ln \left(1 + e^{-\frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)}^\Gamma)}{k_B T}} \right) dE_z; \quad (7.85)$$

$$n_{L(R)}^X = N'_c \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\psi_{L(R)}^X|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}^\Gamma}} \ln \left(1 + e^{-\frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)}^\Gamma)}{k_B T}} \right) dE_z; \quad (7.86)$$

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\max(U_{i5}, U_{i0})}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z. \quad (7.87)$$

Невідомими у формулах (7.85)–(7.87) поки є хвильові функції та коефіцієнт передачі.

Оскільки X -долини в резервуарах вважаються незаселеними,

$$\psi_I^X = 0, \text{ якщо } z < z_1,$$

де z_1 – ліва межа квантової області (праву будемо позначати через z_5). Індексом I, II, III будемо позначати, відповідно, лівий резервуар, квантову область та правий резервуар. Під ψ , доки

не буде зазначено іншого, слід розуміти хвильову функцію електронів, що налітають на квантову область з лівого резервуара.

Електрону в лівому резервуарі (I область) відповідає суперпозиція падаючої та відбитої плоских хвиль:

$$\psi_I^\Gamma = \exp(ik_L^\Gamma z) + r \exp(-ik_R^\Gamma z).$$

Якщо враховувати змішування станів у квантовій системі, на виході з неї в точці $z = z_5$ електрону будуть відповідати уже дві хвилі:

$$\psi_\Gamma^{\text{III}} = t_{\Gamma\text{X}\Gamma} \exp(ik_{R,\Gamma}^\Gamma z); \quad (7.88)$$

$$\psi_X^{\text{III}} = t_{\Gamma\text{X}} \exp(ik_{R,X}^\Gamma z), \quad (7.89)$$

де $k_R^{\Gamma(\text{X})}$ – хвильовий вектор електрона в $\Gamma(\text{X})$ -долині, $k_R^{\Gamma(\text{X})} = \sqrt{2m_{\text{III}}^{\Gamma(\text{X})}(E_{\Gamma(\text{X})} - U_{\Gamma(\text{X})})} / \hbar$; $m_{\text{III}}^{\Gamma(\text{X})}$ – ефективна маса електрона в $\Gamma(\text{X})$ -долині у III області; $t_{\Gamma\text{X}\Gamma}$, $t_{\Gamma\text{X}}$ – сталі інтегрування, що мають сенс комплексного коефіцієнта проходження; $U_{\Gamma(\text{X})}$ – профіль зони провідності (сума потенціальної енергії електрона в полі кристалічної ґратки та просторового заряду).

Ймовірність того, що електрон, пройшовши крізь квантову систему, опиниться в Γ -долині, вже розраховувалася в однодолинній моделі (формула (7.20)), її називають «коефіцієнтом проходження». Для двозонної моделі рівняння (7.20) набуває вигляду

$$T_{\Gamma\text{X}\Gamma} = |t_{\Gamma\text{X}\Gamma}|^2 \frac{|k_{\text{III}}^\Gamma|}{|k_I^\Gamma|} \frac{m_I^\Gamma}{m_{\text{III}}^\Gamma}.$$

Ймовірність того, що електрон, пройшовши крізь квантову систему, вийде через X-долину, розраховують аналогічно:

$$T_{\Gamma\text{X}} = |t_{\Gamma\text{X}}|^2 \frac{|k_{\text{III}}^X|}{|k_I^\Gamma|} \frac{m_I^\Gamma}{m_{\text{III}}^X}.$$

Оскільки події «електрон вийде через Γ -долину» та «електрон вийде через X-долину» взаємовиключні, відповідні ймовірності підсумовуються:

$$T = T_{\Gamma\text{X}\Gamma} + T_{\Gamma\text{X}}.$$

У формулах (7.88) та (7.89) залишаються невідомими сталі інтегрування рівняння Шредінгера. Крім того, невідомими залишаються хвильові функції, потрібні для розрахунку концентрації. Їх пошук є основною проблемою дводолинного моделювання.

У роботі [228], ґрунтуючись на експериментальних даних та розрахунках, здійснених у межах моделі сильного зв'язку, запропоновано метод розрахунку обвідних одноелектронних хвильових функцій ψ_Γ та ψ_X . Подальшого розвитку він набув у [229], був теоретично обґрунтований у [230] та надалі застосовувався в «комбінованих» моделях РТД [231].

Для врахування Γ -X інтерфейсного змішування у рівняння Шредінгера для електрона з $\Gamma(X)$ -долини

$$\hat{H}_{\Gamma(X)}\psi_{\Gamma(X)} = E_{z,\Gamma(X)}\psi_{\Gamma(X)},$$

ліворуч вводиться член $\alpha^{(*)}\cdot\delta(z_k)\psi_{\Gamma(X)}$, що дає

$$\hat{H}_{\Gamma(X)}\psi_{\Gamma(X)} + \alpha^{(*)}\cdot\delta(z_k)\psi_{X(\Gamma)} = E_{z,\Gamma(X)}\psi_{\Gamma(X)}, \quad (7.90)$$

де $\hat{H}_{\Gamma(X)} = U_{\Gamma(X)} - (E - \hbar^2 k_\parallel^2 / 2m_{\Gamma(X)}^*) \equiv U_{\Gamma(X)} - E_{z,\Gamma(X)}$; $k_\parallel^2 = k_x^2 + k_y^2$; m_Γ^* – ефективна маса електрона в Γ -долині; m_X^* – поздовжня²⁴ ефективна маса в X-долині; z_k – координати гетеромеж; δ – дельта-функція Дірака; α – стала міждолинного зв'язку, в загальному випадку комплексна величина, [eV·Å]. Для пари GaAs/AlAs значення α , що узгоджується з розрахунками методом псевдопотенціалів, становить $\alpha = 0,1$ eV·Å [228]. Також використовувалися значення $\alpha = 0,15$ eV·Å [229] та $\alpha = 0,45$ eV·Å [231]; об'єктивні причини вибору таких значень параметра α не вказані.

Щоб зрозуміти суть цього методу, запишемо обидва рівняння (7.90) у матричному вигляді:

²⁴ Нагадаємо, що X-долини, в якій можливі переходи, орієнтовані вздовж напрямку [100], тому маса в z -напрямку, яка мусить використовуватися для розрахунків, дорівнює поздовжній масі в X-долині m_X^l , (вичерпне обґрунтування див. у [195]).

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_\Gamma^*} \frac{d}{dz} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_X^*} \frac{d}{dz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_\Gamma \\ \psi_X \end{bmatrix} + \\
& + \begin{bmatrix} U_\Gamma - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_\Gamma^*} & \alpha \delta(z_k) \\ \alpha^* \delta(z_k) & U_X - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_X^*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_\Gamma \\ \psi_X \end{bmatrix} = 0.
\end{aligned} \tag{7.91}$$

Видно, що за $\alpha = 0$ матриця (7.91) зводиться до двох незалежних рівнянь Шредінгера для X- та Γ -долин, натомість за $\alpha \neq 0$ у точках, що є гетеромежами, «вмикається» взаємодія між X- та Γ -долинами та відбувається змішування електронних станів.

З рівняння (7.91) випливає, що на хвильову функцію на гетеромежах накладаються такі граничні умови:

$$\psi_{\Gamma(X)}(z_{k-}) = \psi_{\Gamma(X)}(z_{k+}); \tag{7.92}$$

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_{\Gamma(X)}^*} \psi'_{\Gamma(X)}(z_{k-}) - \frac{1}{m_{\Gamma(X)}^*} \psi'_{\Gamma(X)}(z_{k+}) \right] + \alpha^{(*)} \psi_{X(\Gamma)}(z_k) = 0, \tag{7.93}$$

де штрихом позначено диференціювання за z . Рівняння (7.91) та (7.93) за $\alpha = 0$ зводяться до звичайних граничних умов окремо для ψ_Γ та ψ_X .

Використовуючи рівняння (7.92) та (7.93), можна побудувати метод матриць передачі та інші умовно-аналітичні методи знаходження коефіцієнта проходження, – так само, як це було зроблено для однодолинної моделі у розд. 7.2.

У дод. Д7.2 описано триточкову скінченно-різницеvu схему, що відповідає виразу (7.91) для всіх внутрішніх точок. Рівняння, що замикають схему, для ψ_Γ такі самі, як для однодолинної моделі (див. дод. Д 7.3). Для ψ_X спосіб отримання замикаючих рівнянь СРС аналогічний; слід лише врахувати, що в X-долині амплітуда хвилі, яка відповідає налітаючому

електрону, нульова, що відображає припущення про незаселеність Х-долини в резервуарах.

Невідомі сталі інтегрування $t_{\Gamma\text{X}\Gamma}$ та $t_{\Gamma\text{X}}$, що використовуються для розрахунку коефіцієнта проходження, знаходять виходячи з того, що $|t_{\Gamma\text{X}\Gamma}(E_z)|^2 = |\psi_N^\Gamma|^2$; $|t_{\Gamma\text{X}}(E_z)|^2 = |\psi_N^{\text{X}}|^2$, де $\psi_N^{\Gamma(\text{X})}$ – хвильові функції електрона з лівого резервуара на межі квантової області та правого резервуара.

Процес знаходження самоузгодженого потенціалу для дводолинної моделі принципово не відрізняється від алгоритму, що описаний для однодолинної (підрозд. 7.3.3), і є його простим узагальненням.

Функція проходження електрона через квантову область РТД $T(E_z)$ з урахуванням Γ –Х-розсіювання зазнає якісних змін, що являють інтерес як із фундаментальної, так і з прикладної точки зору (рис. 7.23). Резонансний характер, властивий однодолинній функції передачі, загалом зберігається (рис. 7.24), однак з’являються додаткові резонанси та антирезонанси з несиметричним профілем. Відомо, що такого типу резонанси можуть проявлятися у фізичних системах різноманітної природи; їх загальна назва – резонанси Фано [232]. Вони виникають у результаті інтерференції двох хвильових процесів. У цьому разі йдеться про інтерференцію станів електрона в Γ - та Х-долинах (термінами квантової механіки це означає, що електрон з енергією E_z перебуває у стані, що є суперпозицією станів у Γ - та Х-долинах).

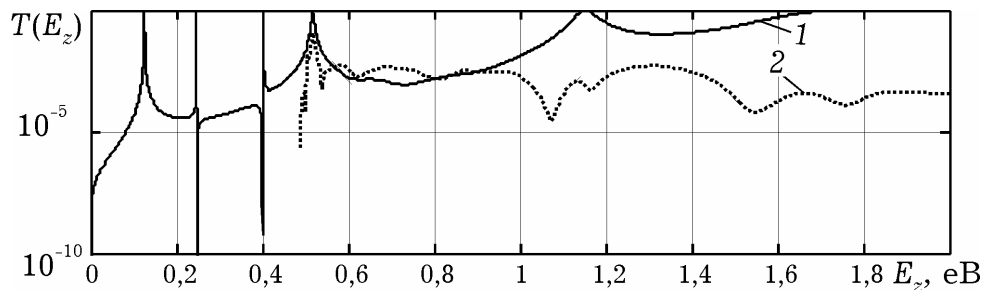


Рис. 7.23. Коефіцієнт проходження $T(E_z)$ у дводолинному наближенні:
1 – $T_{\Gamma\text{X}\Gamma}$; 2 – $T_{\Gamma\text{X}}$ (нульова напруга, моделювання несамоузгоджене)

Ключем до розуміння залежності $T(E_z)$ є графіки, що зображують розподіл густини електронних станів у Γ - та Х-долині,

$g_{\Gamma(X)}(E_z)$ – рис. 7.25, а, б. З них видно, що більш широкі максимуми коефіцієнта проходження (1-й та 4-й) відповідають метастабільним станам у квантовій ямі, яка формується в Γ -долині; вузькі несиметричні резонанси та антирезонанси (2-й та 3-й максимуми та мінімуми, що за ними слідують) спостерігаються для енергій, що відповідають метастабільним рівням у квантовій ямі, яка формується в X -долині.

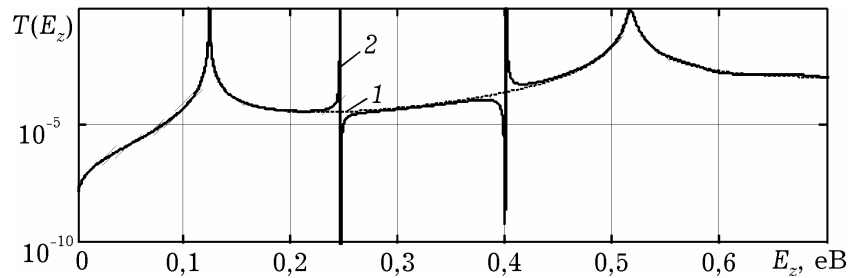


Рис. 7.24. Коефіцієнт проходження з Γ до X -долини, розрахований в межах однодолинної (1) та дводолинної (2) моделей (розрахунки здійснювалися методом матриць передачі за нульової напруги)

Виявлені метастабільні рівні є додатковими каналами перенесення струму через вказану структуру. На ВАХ урахування Γ – X -розсіювання не зумовлює виникнення додаткових піків, хоча якби параметр α мав більше значення, таке цілком могло спостерігатися, як показано в [231]. Натомість спостерігається підвищення густини струму як у долинні, так і в пікові ВАХ, що зазвичай наближає результати моделювання до значень струму, що спостерігаються на практиці (рис. 7.26).

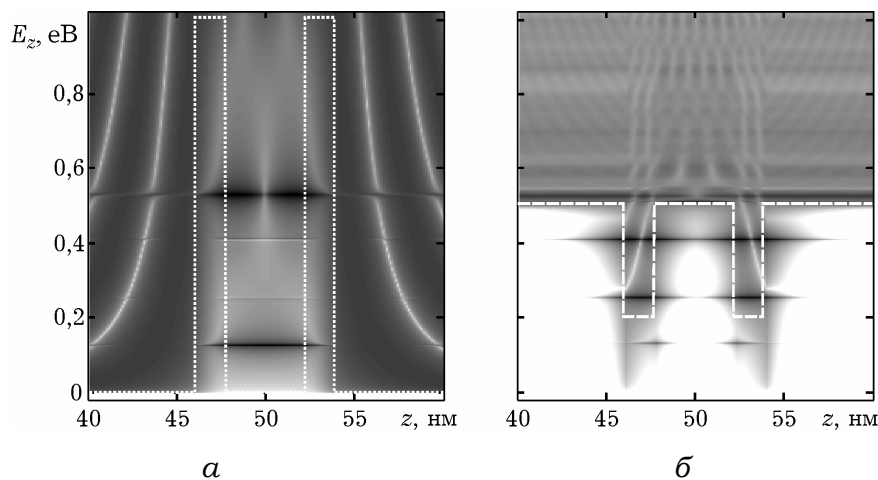


Рис. 7.25. Густина електронних станів у Γ - (а) та X -долинах (б): темніші градації сірого відповідають більшій густині станів у логарифмічному масштабі

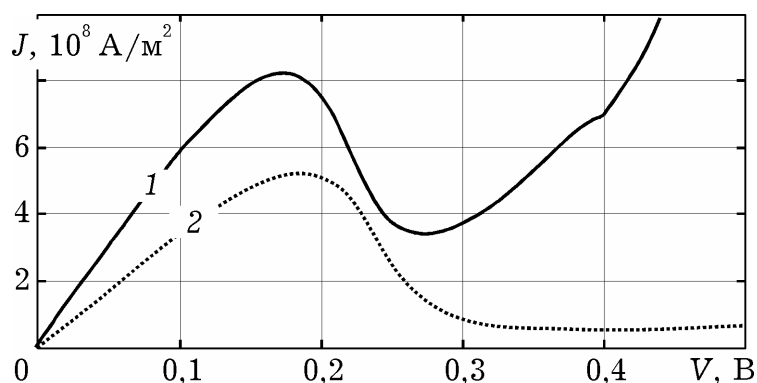


Рис. 7.26. Вольт-амперні характеристики РТД для дводолінного (1) та одностолінного несамоузгодженого моделювання (2): параметр $\alpha = 1 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$

7.5. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛЕЙ

У роботі [233] описано процес виготовлення резонансно-тунельного діода (далі – РТД1) методом молекулярно-променевої епітаксії та результати вимірювання його ВАХ за температури 77 К. Такий діод виготовлено на підкладці з GaAs, легованій домішкою донорного типу, концентрація якої становить $2 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$. На підкладку нанесено високолегований шар GaAs завтовшки

	<i>n</i> -GaAs ($2 \times 10^{24} \text{ м}^{-3}$, 500 нм)
	<i>n</i> -GaAs ($2 \times 10^{23} \text{ м}^{-3}$, 50 нм)
	<i>i</i> -GaAs (5 нм)
	<i>i</i> -AlAs (3 нм)
	<i>i</i> -GaAs (4 нм)
	<i>i</i> -AlAs (3 нм)
	<i>i</i> -GaAs (10 нм)
	<i>n</i> -GaAs ($2 \times 10^{24} \text{ м}^{-3}$, 1000 нм)

Рис. 7.27. Товщина, хімічний склад шарів та концентрація донорної домішки у РТД1

1 мкм, за яким слідує нелеговані шари AlAs/GaAs. Верхній шар складається з високолегованого GaAs товщиною 0,5 мкм. Нелегована частина складається зі спейсерів (5 та 10 нм *i*-GaAs), які запобігають дифузії домішки в бар'єрні шари та накопиченню електронів поблизу двобар'єрної квантової системи. Остання утворена однаковими бар'єрними AlAs-шарами завтовшки по 3 нм, які оточують 3-нанометровий шар GaAs, в якому формується квантова яма (рис. 7.27). Площа мезаструктури становить $16 \times 16 \text{ мкм}$.

Експериментальна ВАХ (рис. 7.28), виміряна за температури 77 К, демонструє пікове значення струму $J_p = 2,4 \cdot 10^6$ А/м² за напруги $V_p = 0,42$ В. Значення струму та напруги в долині ВАХ становлять, відповідно, $1 \cdot 10^6$ А/м² та 0,46 В.

Для порівняння ВАХ РТД1 з даними експерименту використано чисельну дводолину модель. Вхідні дані до неї бралися з рис. 7.27 та з табл. 7.2. Параметри вибиралися переважно з електронного довідника Фізико-технічного інституту ім. Іоффе [226] та не змінювалися з метою кращого узгодження з експериментальними даними. Однак було використано інші два узгоджувальні параметри, а саме: 1) для узгодження ВАХ за піковим струмом усі розраховані значення струму ділилися на 4,3; 2) для узгодження за піковою напругою вся експериментальна крива зсунута на 0,1 В праворуч. Аргументацією введення таких параметрів є, відповідно, точно невідома площа і рівень легування резервуарів та невизначеність величини й залежності від напруги опору пасивних областей. Однак автори не наполягають, що саме ці фактори спричиняють розбіжність експериментальних та теоретичних ВАХ.

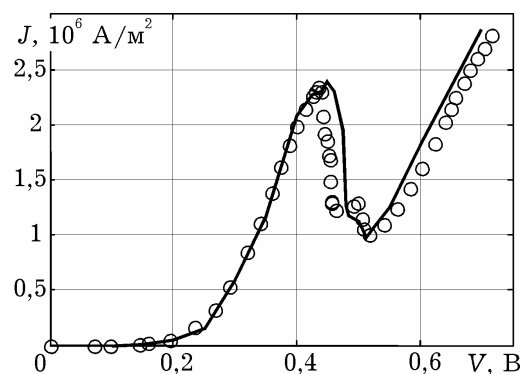


Рис. 7.28. Вольт-амперна характеристика РТД1, розрахована за допомогою дводолинної самоузгодженої моделі з використанням двох припасувальних параметрів (суцільна лінія), збігається з експериментальною кривою (кружечки)

Таблиця 7.2

Фізико-топологічні параметри AlAs/GaAs РТД

Параметр	Значення	Параметр	Значення
T , К	77	m_{GaAs}^{Γ}	0,067
$\hbar\omega_{op}$, еВ	0,036	m_{GaAs}^X	1,3
S_{op} , пс ⁻¹	36	m_{AlAs}^{Γ}	0,15
$\varepsilon_{\text{GaAs}}$	12,9	m_{AlAs}^X	0,97
$\varepsilon_{\text{AlAs}}$	10,06	α , еВ·Å	0,15

Розглянутий РТД1 має традиційну топологію активної частини: однорідні спейсери, між якими містяться три шари, що формують ДБКС. Розглянемо РТД, описаний у роботі [234] (далі – РТД2). Особливістю цього діода є складна структура його верхнього спейсера (рис. 7.29). Останній складається з чотирьох шарів: верхній шар – нелегований GaAs; наступні шари – $\text{Al}_{0,02}\text{Ga}_{0,98}\text{As}$, $\text{Al}_{0,05}\text{Ga}_{0,95}\text{As}$, $\text{Al}_{0,08}\text{Ga}_{0,92}\text{As}$, які формують «ступінчастий емітер», – від резервуара до верхнього бар’єрного шару потенціальний рельєф зони провідності зростає ступінчасто. Приконттактні шари РТД2 складаються з GaAs, легованого домішкою донорного типу з концентрацією $1 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$. Двобар’єрна квантова система включає AlAs-бар’єри та GaAs-ями, товщина яких 3,4 та 5,9 нм відповідно. Нижній спейсер є однорідним нелегованим шаром GaAs. Площа вирощеної мезоструктури становить $16 \times 16 \text{ мкм}^2$. На відміну від РТД1, вимірювання ВАХ проводилися за температури 300 К.

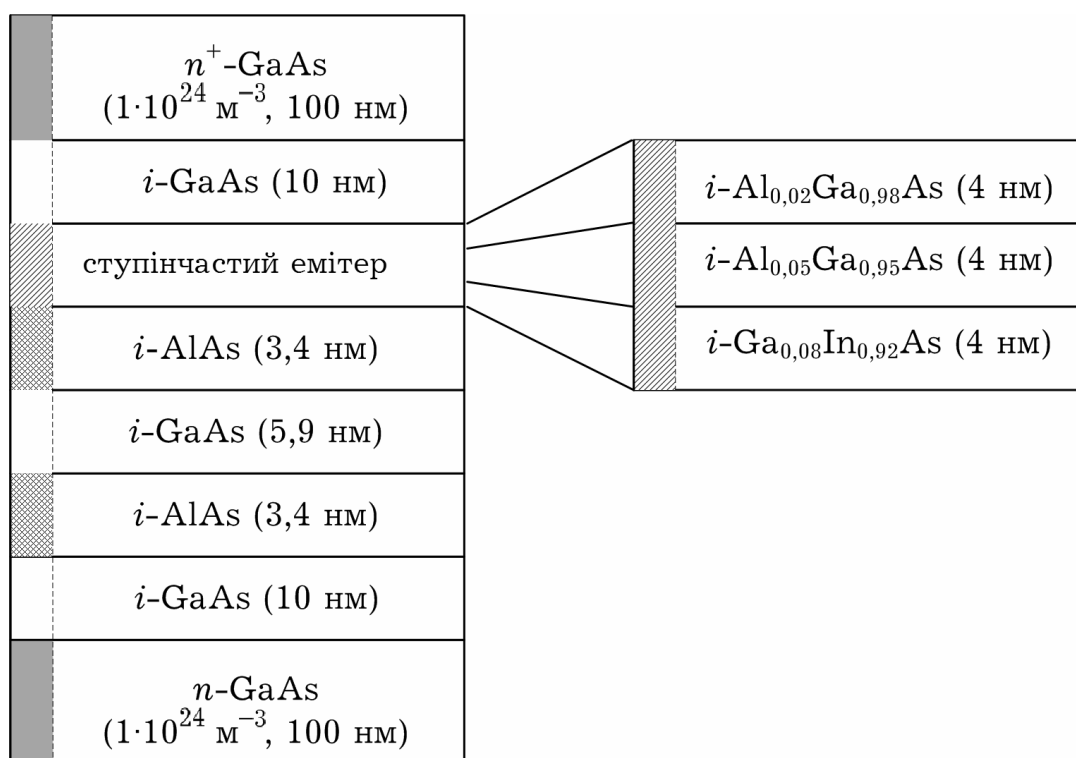


Рис. 7.29. Товщина, хімічний склад шарів та концентрація донорної домішки у РТД1. Праворуч показана структура ступінчастого емітера

Завдяки введенню ступінчастого емітера в топологію діода на ВАХ виникає виразний екстра-пік, що слідує за основним піком (рис. 7.30). Цей пік зумовлений особливістю взаємодії рівнів енергії в емітерній квантовій ямі та основній квантовій ямі завдяки ступінчастій структурі емітера.

Моделювання ВАХ проводилось з використанням однодолинної несамоузгодженої моделі. Остання була вибрана, оскільки, на відміну від самоузгодженої, передбачає існування екстра-піку. Самоузгоджена модель піку не передбачає, хоча дає краще узгодження за піковою напругою. Такий парадокс, можливо, пояснюється тим, що для шарів ступінчастого емітера врахування заряду за методом Хартрі є більш грубим наближенням, ніж лінійний спад потенціалу (через нехтування міжелектронною обмінною взаємодією).

Вхідні параметри для моделювання бралися з рис. 7.29 та табл. 7.2. Для більш якісного порівняння з експериментальними даними розраховані значення густини струму помножувалися на 1,3 – цей коефіцієнт зрівнює характеристики за піковим струмом. Крім того, уся розрахована ВАХ зміщувалася праворуч на 0,03 В – таке зміщення покликане врахувати повністю проігноровані контактні різниці потенціалів, а також опір пасивних областей.

Походження ділянки плато на рис. 7.30 можна зрозуміти, аналізуючи результати моделювання за допомогою чисельної моделі й порівнюючи з ВАХ діода, який має звичайний (*i*-GaAs), а не ступінчастий емітер (рис. 7.31).

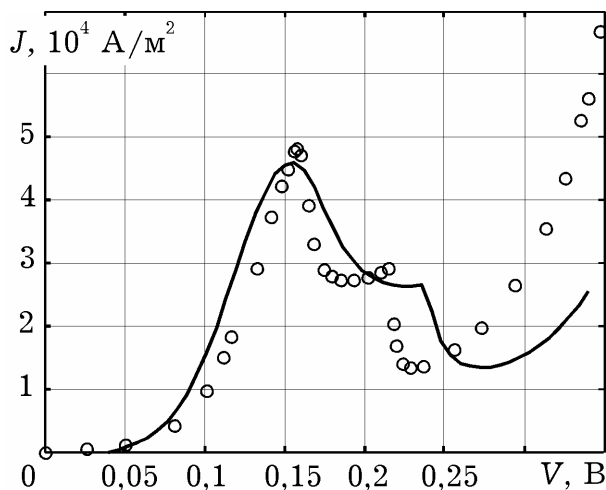


Рис. 7.30. Вольт-амперна характеристика РТД2, розрахована за допомогою однодолинної несамоузгодженої моделі (суцільна лінія) з використанням двох припасувальних параметрів, якісно узгоджується з експериментальною (кружечки)

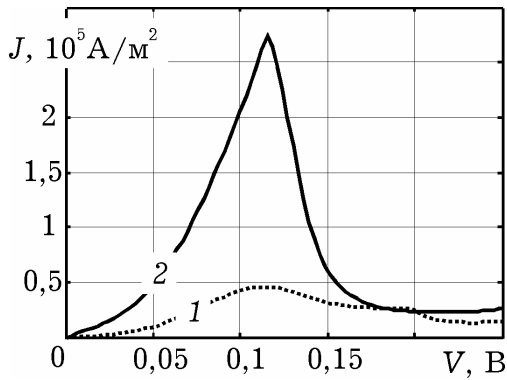


Рис. 7.31. Вольт-амперні характеристики двох діодів, які відрізняються лише структурою емітерного спейсера:
1 – «ступінчастий» емітер (рис. 7.29), 2 – звичайний емітер (22 нм *i*-GaAs)

зі збільшенням напруги (рис. 7.32, б, в) і зумовлює утворення області плато на ВАХ.

Струм, що протікає через РТД, визначається поведінкою коефіцієнта проходження при енергіях, що лежать між рівнем Фермі та дном зони провідності. Можна вважати, що для таких енергій коефіцієнт проходження через квантову систему $T(E_z)$ пропорційний коефіцієнту проходження через ступінчастий емітер T_L і коефіцієнту проходження через решту квантової системи T_R , що включає ДБКС та правий спейсер. Коефіцієнт проходження T_R має резонансний характер, а його максимуми збігаються з центрами метастабільних рівнів основної квантової ями. Коефіцієнт проходження T_L зі збільшенням напруги монотонно зростає. У вказаних межах зміни енергії їх добуток за такої структури ступінчастого емітера в діапазоні напруг 0,15...0,20 В майже не змінюється: зростання T_L компенсується зменшенням T_R . З наступним збільшенням напруги T_R зменшується значно швидше, ніж T_L , відтак T різко зменшується – це спричиняє спад густини струму. Динаміку зміни підінтегральної функції у формулі Цу–Есакі показано на рис. 7.33, а. Видно, що, на відміну від монотонного зменшення площі під підінтегральною функцією, як це відбувається для діода зі

Для обох структур основний пік спостерігається, коли метастабільний рівень в основній квантовій ямі лежить між дном зони провідності та рівнем Фермі в лівому резервуарі (рис. 7.32, а). При цьому для ступінчастого емітера піковий струм у кілька разів менший, ніж для звичайного, оскільки між лівим резервуаром та основною квантовою ямою містяться бар'єри, утворені шарами ступінчастого емітера. Характер видозміни цих бар'єрів

звичайним емітером (рис. 7.32, б), для діода зі ступінчастою структурою емітера за рахунок описаних ефектів підінтегральна функція поводить себе так, що точка максимуму в області від'ємної диференціальної провідності описує резонансну криву, а площа під підінтегральною кривою майже стала (рис. 7.32, а).

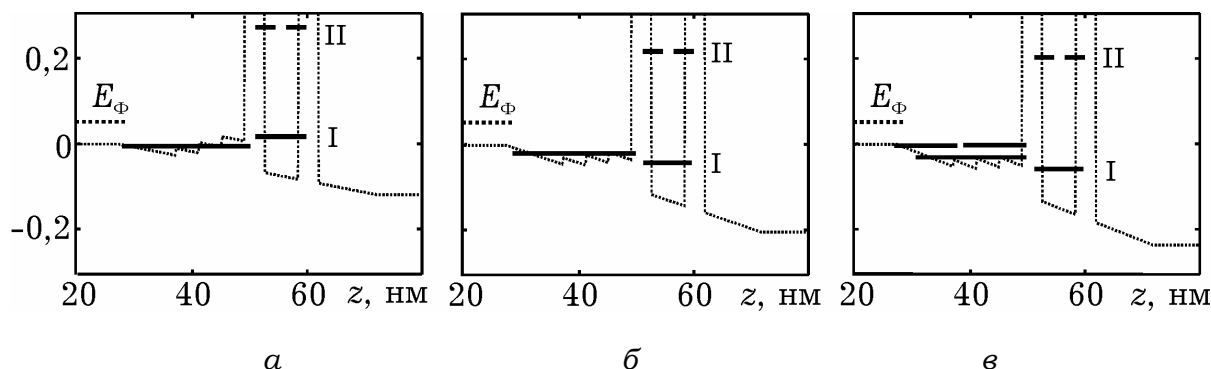


Рис. 7.32. Положення рівнів енергії та рівня Фермі у ДБКС діода зі ступінчастим емітером: пікова напруга, $V = 0,119$ В (а); напруга екстра-піку $V = 0,197$ (б); напруга долини $V = 0,23$ (в) (найбільша густина струму через діод спостерігається, коли рівень енергії в основній квантовій ямі лежить між E_F та E_C ; екстра-пік та долина на ВАХ виникають, коли рівень в основній квантовій ямі опиняється нижче дна зони провідності)

Резюмуючи наведені результати верифікації та враховуючи досвід авторів, зазначимо, що описані моделі РТД з усіх параметрів ВАХ найкраще передбачають величину контрастності (величина, що дорівнює відношенню пікового та долинного струмів). За цим параметром відмінність від експериментальних даних становить не більше 5 %. Абсолютні ж значення вимірюваного струму відрізняються від теоретичних у декілька разів (зазвичай не більше, ніж удвічі), причому закономірностей цієї розбіжності нами не виявлено. Найбільш імовірною причиною може бути те, що в реальних діодах профіль легування резервуарів може відрізнятися від номінального. У статті [187] йдеться, що концентрація донорної домішки в резервуарах може відрізнятися у два рази; крім того, площа мезоструктури не піддається точному вимірюванню. Відомо також, і це підтверджується експериментально, що залежність пікового струму від товщини бар'єра має експоненціальний характер, тому варіації товщини

бар'єрних шарів у межах одного моношару можуть призводити до зміни струму в межах одного порядку.

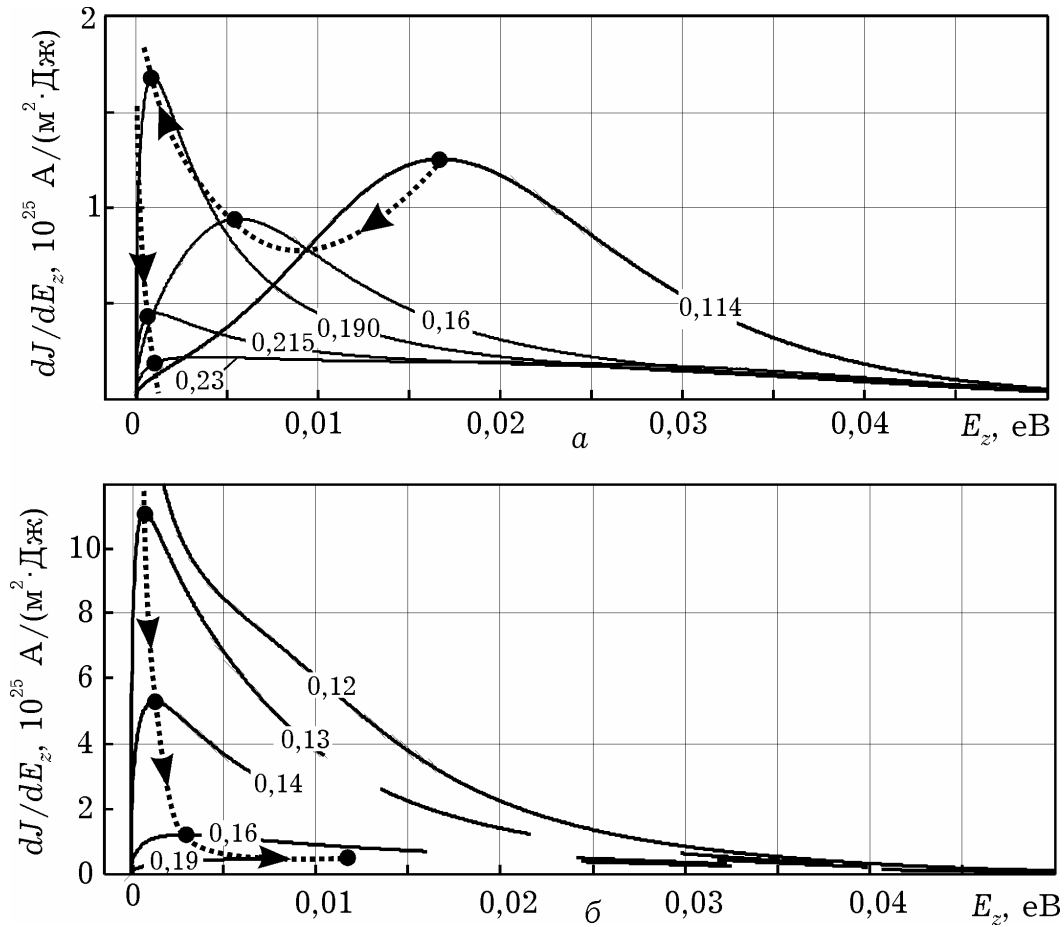


Рис. 7.33. Динаміка зміни підінтегральної функції за напруг від пікової до долинної (показані цифрами у вольтях): пунктирною лінією показано траєкторію точки максимуму підінтегральної функції у формулі Цу–Есакі; РТД зі ступінчастим емітером (а); РТД зі звичайним емітером (б) (у випадку «а» за напруг від 0,115...0,197 В площа під кривою майже не змінюється; у випадку «б» монотонно зменшується у міру росту напруги від пікової до долинної)

Навіть під час самоузгодженого моделювання теоретично передбачувана пікова напруга не досягає значень, виміряних в експерименті. Це зазвичай пояснюють наявністю послідовно увімкненого опору пасивних областей, залежність цих опорів від напруги нелінійна. Зазвичай навіть у діодах із симетричною квантовою системою пікові напруги відрізняються не менше, ніж на 0,1 В. Наскільки відомо, системних робіт з аналізу впливу пасивних областей на ВАХ немає, хоча деякі спроби робилися [235].

Найскладніше передбачити форму залежності $J(V)$ між піковою та долинною напругами. На цій ділянці диференціальна провідність переважно від'ємна, однак у багатьох РТД її значення може змінюватися так, що утворюються одна чи більше ділянок, на яких диференціальний опір майже нульовий. Наявність таких ділянок прослідковується для всіх РТД незалежно від матеріалів та технологій. Зазвичай їх називають ділянками плато, оскільки вони мають вигляд майже горизонтальних ліній на схилі N -подібної ВАХ. Наявні моделі РТД, включно з описаними, передбачають монотонний спад струму на ділянці від'ємної диференціальної провідності²⁵. Звідси слідує, що плато на ВАХ зумовлене механізмами транспорту, які не включені в моделі. На цьому припущенні ґрунтуються теорії, що включали до наявних моделей фактори, які, на думку авторів згаданих моделей, відповідали за утворення області плато. Висловлювалися думки про те, що ця ділянка пов'язана з внутрішньою [216] та зовнішньою [236] нестабільністю, з Γ - X - Γ -перенесенням у межах дводолинної моделі [231]. Водночас було отримано експериментальні підтвердження того, що формування таких областей зумовлюється метастабільними станами в квазітрикутній емітерній квантовій ямі [237]. Однак включення до розгляду вказаного механізму транспорту для моделей РТД стало справжнім викликом, оскільки потрібно було описати процеси непружного розсіювання з урахуванням розмірного квантування. Поки що це вдалося здійснити лише за допомогою феноменологічної моделі [222], яка передбачає формування ділянки плато за експериментально верифікованим механізмом, однак кількісного узгодження здобути не вдалося почасти тому, що модель не передбачає області плато в межах самоузгодженої моделі, а також не забезпечує виконання закону збереження струму.

²⁵ Винятком є моделі, розроблені в межах формалізму функції Вігнера, які *якісно* передбачають таку ділянку. Однак наявність області плато є чи не єдиним експериментальним фактом, який вони передбачають, а сам формалізм Вігнера піддають критиці як теоретично недостатньо обґрунтований [238].

Також помічено, що самоузгоджені моделі можуть виявлятися менш адекватними, ніж моделі, в яких приймається припущення про лінійний спад потенціалу в активній області. На основі проведеної у розд. 7 верифікації можна виділити два таких випадки:

1) ВАХ РТД2, розрахована самоузгоджено, не передбачає області плато, яка зумовлена наявністю ступінчастого емітера;

2) ділянка плато на ВАХ РТД з однорідним стехіометричним складом емітера, зумовлена транспортом між емітерною та основною квантовими ямами [222], також передбачається лише в межах несамоузгодженої моделі.

Крім того, збіг за піковим та долинним струмом краще досягається переважно в межах несамоузгодженої моделі; краще також узгоджуються і форми ВАХ. Таким чином, чи не єдиним аргументом, що вказує на доцільність використання методу Хартрі для врахування просторового заряду, є те, що передбачена ним пікова напруга ближча до спостережуваної в експерименті.

Рекомендована література: [8]; [22]; [130]; [180]; [181]; [182]; [183]; [184]; [185]; [186]; [187]; [188]; [189]; [190]; [191]; [192]; [193]; [194]; [195]; [196]; [197]; [198]; [199]; [200]; [201]; [202]; [203]; [204]; [205]; [206]; [207]; [208]; [209]; [210]; [211]; [212]; [213]; [214]; [215]; [216]; [217]; [218]; [219]; [220]; [221]; [222]; [223]; [224]; [225]; [226]; [227]; [228]; [229]; [230]; [231]; [232]; [233]; [234]; [235]; [236]; [237]; [238].

8. ПЕРСПЕКТИВНІ НАНОСТРУКТУРИ І НАНОКОМПОНЕНТИ

8.1. ПОРІВНЯЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОЧАСТИНОК

Один із напрямів підвищення швидкодії електронних компонентів – використання нових фізичних ефектів у перспективних матеріалах і нанорозмірних структурах.

Зазвичай для створення нанoeлектронних компонентів використовують освоєні сучасними мікроелектронними технологіями структури низької розмірності: двовимірні у вигляді шарів наноскопічних розмірів, одновимірні – квантові нитки або дроти, і нульвимірні – квантові точки. Але як сучасні на-нокомпоненти електроніки можуть також використовуватися різні за фізичними і хімічними властивостями структури та наноматеріали – це зазвичай різні речовини, що складаються з атомів і молекул, мають різні хімічні зв'язки і будову кристалічної ґратки, а також некристалічні з'єднання й біооб'єкти – нуклеїнові кислоти, протеїни, віруси, клітини (рис. 8.1). Сучасні наноструктури як електронні компоненти використовують різні поєднання таких матеріалів. Вже відомі практичні структури наносенсорів, що використовують властивості молекул змінювати провідність каналу польового транзистора на основі нано-провідника [239].

Сучасні наноструктури як електронні компоненти використовують нанооб'єкти в різних поєднаннях. Більш докладну характеристику властивостей частинок, молекул і нанооб'єктів, механізми зміни їх станів наведено в табл. 8.1. Проаналізуємо швидкісні властивості (час і енергії перемикання), вплив шумів (термальні помилки і різноманітні флуктуації), щільність компонування структур, потужності розсіяння, методи модуляції тощо.

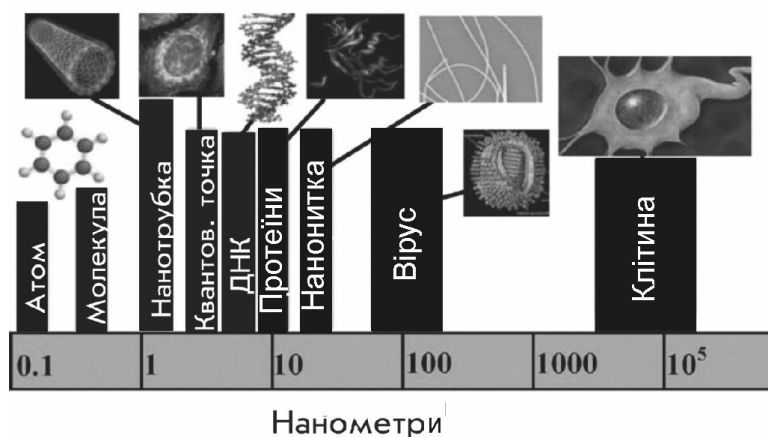


Рис. 8.1. Порівняльні розміри наноструктур і нанооб'єктів

Відомо, що в електронних компонентах, що використовують ефект поля, обмежувальними чинниками є скінченний час релаксації енергії (близько 1 пс), термальні ефекти й квантові ефекти. При цьому «порогова енергія» становить $3k_B T \ln 2$ (близько 0,05 еВ). До класу спітронних компонентів належать структури, що використовують прецесію спіну одиночного електрона, процеси релаксацій монообласті спіну або хвилі спінів, що виникають під впливом магнітного поля. У першому випадку час перемикання обмежується граничною частотою прецесії спіну електрона, у другому – часом релаксації спіну домена (близько 10 пс), а в останньому (до 10 пс) – максимальною частотою зміни магнітного поля. Третя група наведених у табл. 8.1 можливих для реалізації компонентів використовує фізичні й молекулярні зміни – рух молекул (однією з перспективних є молекула ротаксана [240]), обертання молекул, фазові зміни в матеріалах. Швидкість перемикання в таких структурах обмежується частотою вібрації молекул, яка для першого і другого випадку становить близько 0,1 пс, а для випадку фазових змін – 1 нс. Оскільки фізичні розміри молекул істотно більші за електронні й спітронні структури, потрібні істотніші енергетичні витрати («енергія перемикання» зростає на порядки), пов'язані з модуляцією характеристик молекулярних структур, однак при цьому можливе отримання більш потужних компонентів. Слід також зазначити,

що ймовірність термальної помилки для таких компонентів на декілька порядків менша, ніж для електронних і спітронних структур.

Є фізичні чинники масштабних обмежень для наноструктур з різними механізмами модуляції характеристик. Для електронних структур і структур з «одиначним електронним спіном» це температурні й квантові ефекти, для структур із монообластю спіну і спінхвилями – це прояв ефекту надпарамагнетизму й обмеження швидкості поширення хвиль спінів. Для молекулярних структур – це проблеми стабільності молекул і збирання (технології отримання структур з повторюваними характеристиками), а для структур, що використовують фазові зміни, – проблема відведення тепла. Технологічною проблемою є також компонування і збирання нанокомпонентів інтегральних схем з істотно різними властивостями – це можуть бути напівпровідники і вуглецеві матеріали (фулерени), феромагнетики, молекули органічних і неорганічних сполук, металовуглеці, калгоніди та ін.

У роботі [241] наведено результати експериментальних досліджень контакту «органічна молекула–металева поверхня». Як передбачено, спостерігається хімічний механізм взаємодії між молекулою і металевим електродом, пов'язаний зі зміною електронної густини і наявністю молекулярного електростатичного потенціалу. Розглядається система з двох зв'язаних атомів вуглецю, сполучених з кільцями фенілу (рис. 8.2). У процесі взаємодії виникають зміни в геометрії молекули, що характерно для хімічно зв'язаних елементів, які можуть відбуватися на відстані близько 1 нм. Моделі цих процесів передбачають утворення квантово-механічних кластерів біля поверхні металевого електрода. При цьому вважається, що хвильові функції атомів металу локалізуються, тобто взаємодія певного шару металу не змінює хвильових функцій сусідніх шарів металевого електрода.

Таблиця 8.1. Характеристики частинок і нанооб'єктів*

Об'єкт	Електрон	Електронний спіл			Фізичні молекулярні зміни		
		Одиночний	Монообласть спіну	Спінхвиля	Рух молекул	Обертання молекул	Фазові зміни
Швидкість перемикання	1 пс (час релаксації енергії)	1пс (частота прецесії)	10 пс (час релаксації домена)	10 пс (зовнішнє магнітне поле)	0,1 пс (частота вібрації)	0,1 пс (частота обертання)	1 нс (частота вібрації)
Енергія перемикання	0,05 еВ на 1 електрон	0,05 еВ на 1 спіл	0,05 еВ	0,03 еВ	0,8 еВ на 521 атом	0,7 еВ на 115 атомів	3 еВ на 54 атоми
Ймовірність термальної помилки	0,6	0,6	0,6	0,75	0,0001	0,0001	0,0001
Щільність компонентів/см ²	10 ¹⁴	10 ¹⁴	10 ¹¹	10 ⁹	10 ¹²	10 ¹²	10 ¹³
Потужність розсіяння	1 мВт/см ²	1 мВт/см ²	1 кВт/см ²	1 Вт/см ²	1 мВт/см ²	1 мВт/см ²	100 кВт/см ²
Масштабний чинник обмеження	Температурні і квантові ефекти	Температурні і квантові ефекти	Надпарамагнітність	Швидкість поширення	Стабільність молекул, розміри, збірка	Стабільність молекул, розміри, збірка	Розсіяння тепла
Метод модуляції	Ефект поля	Магнітне поле, спіно-орбітальна взаємодія	Магнітне поле, спіно-орбітальна і магніто-електрична взаємодія	Електричне тяжіння	Фотони, тепло, електрони	Фотони, тепло, електрони	Джоулеве тепло
Переважний матеріал	A ^{III} B ^V , Si та ін.	Невідомо	Феромагнетики	Феромагнетики	Ротаксан	Металовуглеці	Калгоніди

* Дані взято з роботи [240]

Модуляція провідності контакту «метал–молекула» відбувається у разі зміни електричного зміщення на металевій поверхні, що приводить до зміни довжини зв'язків і перенесення електронів унаслідок тунелювання. Механізм модуляції провідності внаслідок поверхневої поляризації вуглецевої нанотрубки, що є каналом польового транзистора, реалізований у нанобіосенсорі (рис. 8.3).

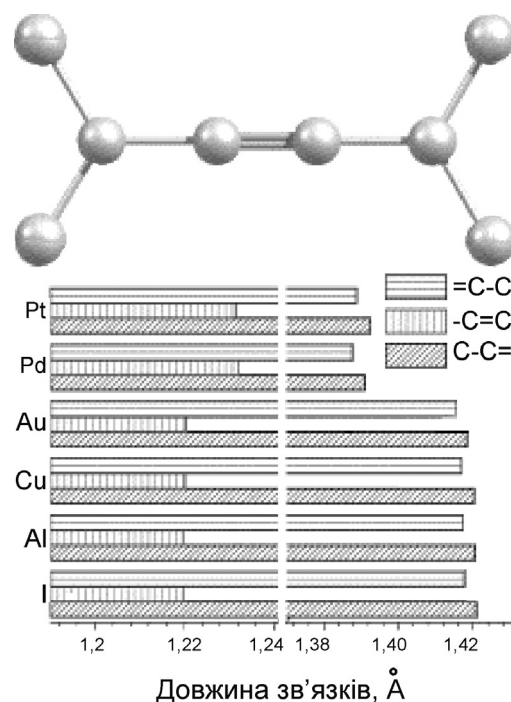


Рис. 8.2. Довжина зв'язків контакту «метал–молекула» для різних матеріалів

У разі захоплення органічних молекул на поверхні нанотрубки відбувається збіднення (або збагачення) носіями каналу транзистора залежно від типу провідності нанотрубки. Такі біосенсиори можуть використовуватися для дослідження протеїнів, ДНК, різних антитіл та інших біоб'єктів.

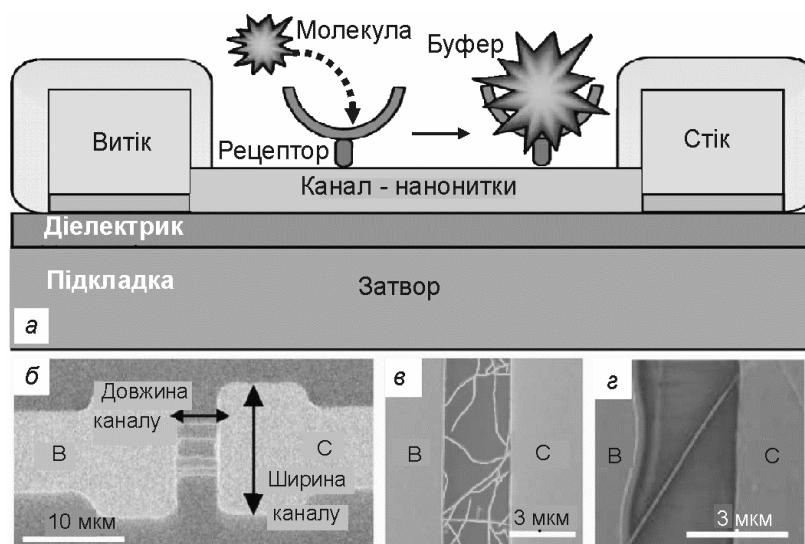


Рис. 8.3. Принцип роботи нанобіосенсора (а), топологія (б), технології реалізації каналу транзистора – на вуглецевій нанотрубці (в) та на нанопровіднику з оксиду індію (г)

8.2. НАНОКОМПОНЕНТИ

З ВИКОРИСТАННЯМ ТУНЕЛЬНОГО ЕФЕКТУ

Одноелектронний транзистор з унікальними характеристиками, виконаний у структурі «кремній на ізоляторі» з тунельними переходами і вбудованими квантовими точками, описаний у роботі [242]. У ньому тунельні переходи і квантові точки істотно менші за полікристалічні кремнієві гребінчасті затвори з довжиною близько 70 нм, а міжелектродні відстані становлять близько 240 нм. Топологія і параметри транзистора подано на рис. 8.4. Така технологія дозволяє отримувати квантові точки з контрольованими параметрами. Область під затвором має профіль легування у вигляді зворотного гаусіана, що приводить до створення потенціального бар'єра. Ефективна робота транзистора пов'язана з необхідністю перевищення енергії кулонівської взаємодії над енергією термальних флуктуацій. Якщо за рахунок теплового руху частинка набуває досить великої енергії, вона може прорвати кулонівську блокаду. Тому для кожного одноелектронного пристрою існує своя критична температура, вище за яку вона перестас працювати. Ця температура обернено пропорційна площі переходу: чим менша його ємність, тим більший стрибок напруги і тим вищий бар'єр кулонівської блокади.

Основні характеристики одноелектронного транзистора подано на рис. 8.4. Унікальність розглянутого у цій роботі транзистора полягає в отриманні вихідних характеристик за кімнатної температури.

У роботі [243] подано спрощену аналітичну модель для розрахунку струму кремнієвого одноелектронного транзистора з дискретними квантовими рівнями енергії й параболічними бар'єрами тунельних переходів. У моделі розглянуто тільки три найімовірніші стани: основний рівень і перший збуджений рівень для кожного електрона. Вважається також, що опір тунельного переходу більший, ніж квантовий опір $h/e^2 = 25,8$ кОм і квантові флуктуації пригнічуються.

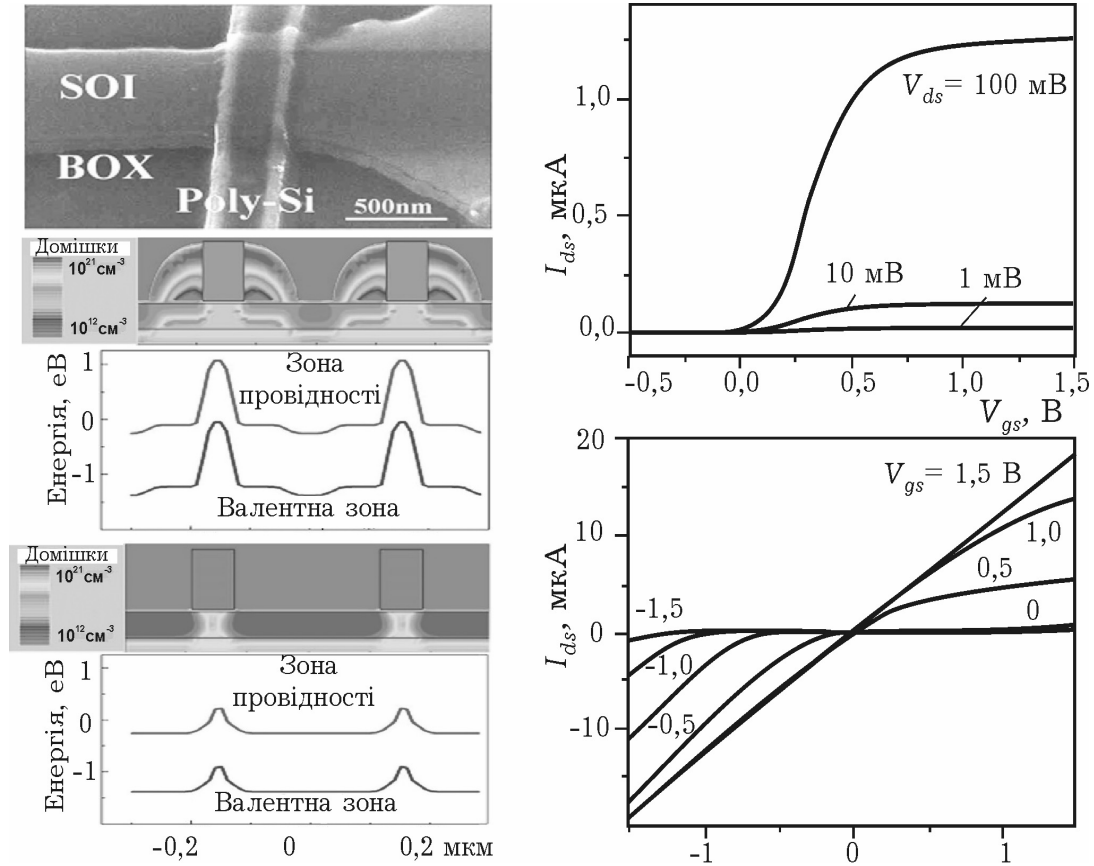


Рис. 8.4. Топологія одноелектронного транзистора, енергетичні діаграми та ВАХ за $T = 300$ К

Крім того, немає тунелювання вищого порядку – «співтунелювання», за якого зберігається енергія лише між початковим і кінцевим станами всього масиву переходів, а також не враховується непружне тунелювання, яке супроводжується генерацією або рекомбінацією електронно-діркових пар. Зазвичай для спрощених моделей вважається, що час тунелювання нехтовно малий порівняно з іншими, зокрема інтервалами між тунельними переходами окремих частинок. Квантові енергетичні рівні дискретні (рис. 8.5) з інтервалом ΔE_n , а електростатична енергія $E_c = e^2/C_\Sigma$, де C_Σ – сумарна ємність транзистора.

Ймовірність заповнення кожного з трьох станів визначають за такими формулами:

$$P_{G,n} = \frac{\Gamma_{G,(n+1,n)} - \Gamma_{E,(n+1,n)}}{A}; P_{G,n+1} = \frac{\Gamma_{G,(n,n+1)} - \Gamma_{E,(n,n+1)}}{A}; P_{E,n+1} = \frac{\Gamma_{E,(n,n+1)} - \Gamma_{G,(n+1,n)}}{A},$$

де $A = \Gamma_{E,(n,n+1)}\Gamma_{G,(n+1,n)} + \Gamma_{G,(n,n+1)}\Gamma_{E,(n+1,n)} + \Gamma_{G,(n+1,n)}\Gamma_{E,(n+1,n)}$; Γ – швид-

в пакеті схемотехнічного проектування HSPICE для розрахунку швидкодіючих ключів.

Для створення швидкодіючої одноелектронної структури необхідно, щоб опір тунельного переходу був істотно вищим від квантового опору. Виконуючи цю умову, можна знехтувати когерентними квантовими процесами, що пов'язані з одночасними тунельними переходами.

Коли енергія зарядки порівнянна з енергією термічних флуктуацій, може проявлятися ефект кулонівської блокади (кулонівських сходів). Для приладів з розмірами квантової точки (кластера) до 10 нм зміна енергії переходів може досягати 0,1 еВ й одноелектронні ефекти можуть виявлятися за кімнатних температур. У процесі тунелювання можливе проходження дробового заряду (дробового квантування), що може бути пов'язане з тим, що хвильова функція електрона може розподілятися між електродами, впливаючи на енергетичну картину.

Для моделювання таких приладів недостатньо квазікласичного опису на рівні дрейфово-дифузійних або кінетичних моделей – потрібне використання апарату квантової механіки. Для опису нерівноважних процесів необхідно самоузгоджено вирішувати рівняння Пуассона і Шредінгера, що можливо, наприклад, із залученням функцій Гріна.

У роботі [244] описано транзистор, в якому реалізований резонансно-тунельний ефект. Тунельні переходи індукуються зовнішнім полем як показано на рис. 8.6, де наведені енергетичні діаграми «тунельного» транзистора для різних зміщень на затворі: на рис. 8.6, а тунельні переходи відбуваються, а на рис. 8.6, б тунелювання не спостерігається. Транзистор з довжиною затвора 20 нм і шириною 50 нм виконаний за технологією «кремній на ізоляторі» з n -каналом у вигляді нанодроту.

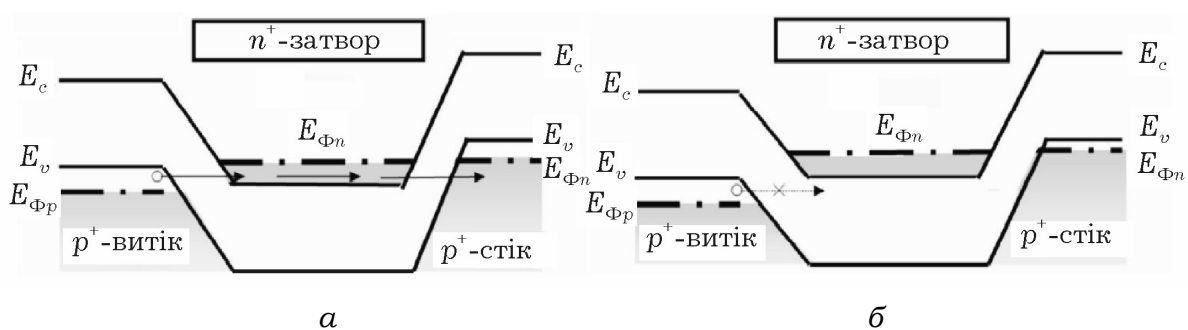


Рис. 8.6. Енергетичні діаграми «тунельного» транзистора для різних зміщень на затворі

8.3. НИЗЬКОРОЗМІРНІ СТРУКТУРИ НА ОСНОВІ ГРАФЕНА

Останнім часом дедалі більшу зацікавленість викликає використання унікальних властивостей графену (рис. 8.7). На відміну від металів і напівпровідників, для яких закон дисперсії в зоні провідності можна з хорошою точністю вважати за квадратичний (енергія квазічастинок прямо пропорційна квадрату імпульсу), для графену закон дисперсії зовсім інший. Графен не можна віднести ні до металів, ні до напівпровідників, ні, тим більше, до діелектриків. Графен – напівметал (не єдиний, до такого класу речовин належать ще бор, кремній, германій, арсен, полоній, графіт та ін.). З погляду зонної теорії графен – це речовина, в якій, на відміну від металів, валентна зона і зона провідності стикаються (забороненої зони немає, як і в металах). Точки дотику в графені утворюють точки Дірака (рис. 8.7, б). У цих точках закон дисперсії має лінійний вигляд: енергія електронів прямо пропорційна їх імпульсу.

Подібну залежність енергії від імпульсу мають також і безмасові частинки – фотони. Отже, реальні частинки – електрони – у графені поведуться як фотони, тобто мають нульову масу і їх енергія не залежить від швидкості руху, тому закон дисперсії квазічастинок у графені називають релятивістським. Проте, на відміну від фотонів, електрони в графені ще мають заряд і напівцілий спин, тобто є ферміонами, тому електрони

графену називають також *діраківськими ферміонами*. Серед відомих у наш час речовин немає аналогів з подібним «графеновим» законом дисперсії.

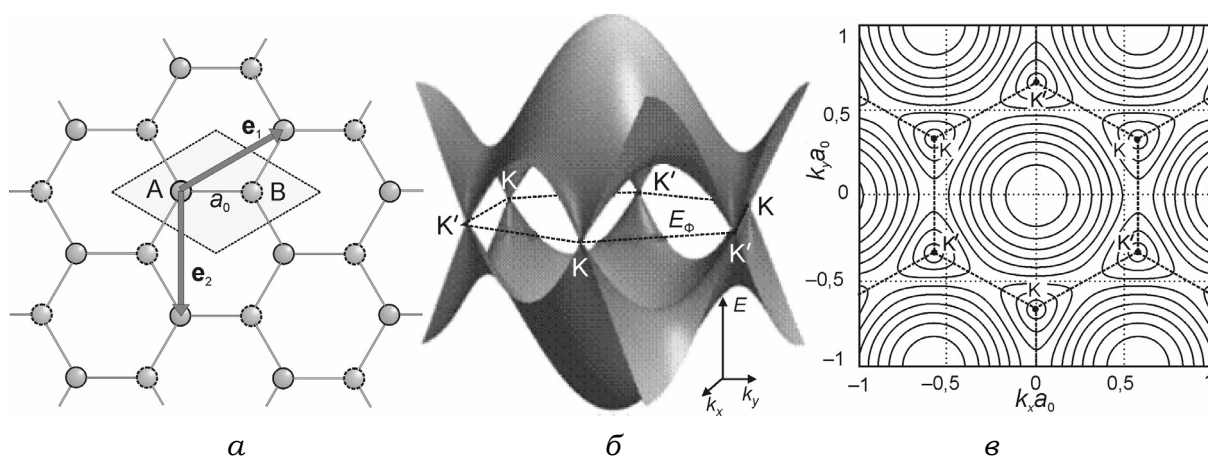


Рис. 8.7. Кристалічна структура графену з двома підґратками (а), виділено елементарну комірку та вектори трансляції; закон дисперсії у тривимірному зображенні (б) та з допомогою ізоенергетичних ліній (в) з точками дотику зони провідності й валентної зони в точках K' і K (штрихова лінія відповідає енергії Фермі)

Рівні Ландау вперше виявлені у двовимірній структурі провідника в магнітному полі. При цьому електрони в такому провіднику рухатимуться по замкнених орбітах з циклотронною частотою $\omega_c = eB/\hbar$, залежною від індукції магнітного поля. Енергія такого руху квантується $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_c$ і пропорційна квантовому числу n , що позначає номер орбіти або рівня. Множина таких замкнених орбіт утворює рівні Ландау. Відстань на енергетичній шкалі між сусідніми орбітами однакова і дорівнює $\hbar\omega_c$ – рівні Ландау еквідистантні. У разі нульового рівня ($n = 0$) енергія електронів не стає рівною нулю.

Квантування Ландау приводить до виникнення щонайменше двох явищ: ефекту де Гааза ван Альфена та ефекту Шубнікова–де Гааза. Перший полягає в осциляціях намагніченості матеріалу в сильному магнітному полі (близько 1 Тл) за температури рідкого гелію, другий – в осциляціях провідності за тих же умов. Низька температура і сильне магнітне поле дозволяють уникнути значного впливу температури на

виявлення квантування Ландау. У цих ефектах піки на осциляціях фізичних величин є ознакою утворення рівнів Ландау.

У графені через лінійність закону дисперсії рівні Ландау квантуються інакше: $E_n = \pm \sqrt{2e\hbar v_F^2 |n| B}$ (рис. 8.8, а). Енергія кожного рівня відраховується від енергії в діраківській точці E_D – точці дотику зон валентної і провідності. По-перше, енергія квазічастинок у графені залежить від номера орбіти як \sqrt{n} , тому рівні Ландау в ньому не еквідистантні, і, по-друге, за $n = 0$ енергія електронів у графені дорівнює нулю навіть за наявності магнітного поля.

У роботі [245] знайдено підтвердження цих особливостей квантування Ландау в графені. Графен був вирощений на підкладці з карбіду кремнію SiC. На відміну від традиційного «фундамента», для отримання графену (з оксиду кремнію), використання SiC дозволило уникнути непотрібного впливу підкладки на наступні вимірювання. Фіксація рівнів Ландау в обговорюваній роботі відбувалася за допомогою ефекту Шубнікова–де Гааза. Зі зміною напруги на досліджуваному зразку вимірювалася його провідність під дією сильного магнітного поля за температури 4,3 К. Результат одного з таких вимірювань – у магнітному полі з індукцією 5 Тл – показано на рис. 8.8, б.

По осі абсцис відкладено напругу, що прикладається, в енергетичних одиницях (MeV), по осі ординат – виміряна провідність графену (у наносименсах). Яскраво виражені піки на осцилюючій залежності свідчать про те, що експериментально спостерігається квантування Ландау. На цьому графіку видно і нееквідистантність розміщення рівнів Ландау.

Електрони в графені формально описуються гамільтоніаном діраківського вигляду, що зумовлено симетрією кристалічної ґратки, яка складається з двох еквівалентних вуглецевих підґраток [246]:

$$H = -i\hbar v_F \sigma \nabla,$$

де v_F – швидкість ферміонів, $v_F \approx 10^6$ м/с; σ – матриця Паулі,

$\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$. Такий опис теоретично строгий у разі нехтування багаточастинковими ефектами і підтверджений експериментально вимірюванням циклотронної маси носіїв у графені залежно від їх енергії.

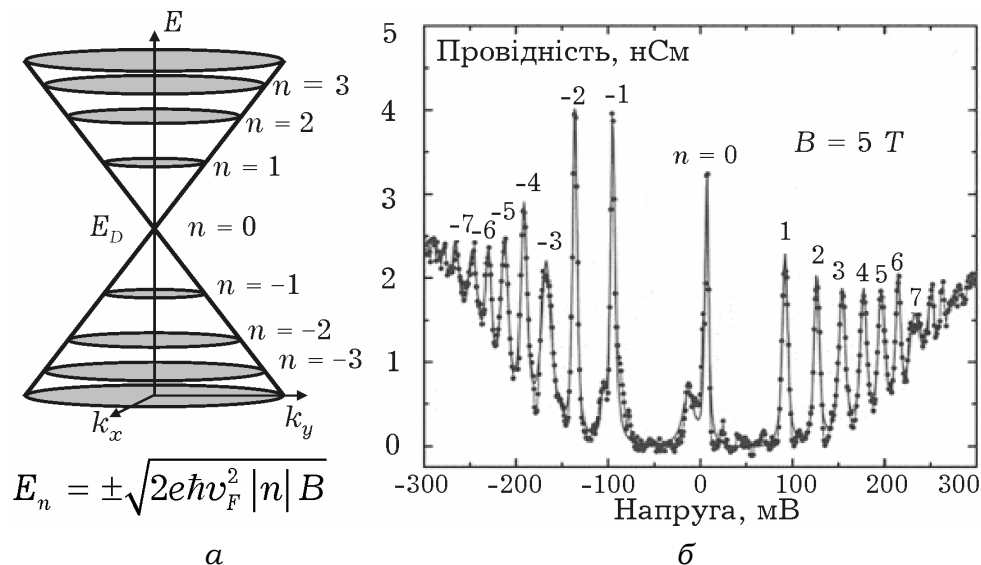


Рис. 8.8. Схематичне зображення закону дисперсії електронів у графені в магнітному полі (а), або рівнів Ландау для електронів (верхні кола) і дірок (нижні кола); результати вимірювання квантування Ландау в графені в зовнішньому магнітному полі 5 Тл (б), – експериментально отримані дані показані точками; крива – інтерполяція експериментальних результатів; кожен сплеск на осцилюючій кривій відповідає рівню Ландау (нумерацію вказано на кривій)

У графені за позитивних енергій (вищих за діраківську точку) струмопровідні стани подібні до електронів і заряджені від'ємно [246]. За від'ємних енергій, якщо валентна зона цілком не заповнена, квазічастинки поведуться як позитивно заряджені частинки (дірки) і можуть розглядатися як твердотільний аналог позитронів. Попри те, що електрони і дірки у фізиці твердого тіла описуються рівняннями Шредінгера зі своїми ефективними масами, у графені електрони та дірки виявляються взаємозв'язаними, мають властивості зарядово-спряженої симетрії. У графені це зумовлено симетрією його кристалічної ґратки і тим, що квазічастинки описуються двокомпонентною хвильовою функцією, побудованою на основі двох підґраток.

У роботах [247; 248] унікальні фізичні характеристики графену в структурі з p - n -переходом використовуються для генерації та передавання плазмонних коливань (хвиль густини заряду) в терагерцовому діапазоні. Генерація плазмонів у графені подібна до оптичної генерації в результаті стимульованої емісії фотонів у лазерах на багатодолинних напівпровідниках у терагерцовому діапазоні (рис. 8.9).

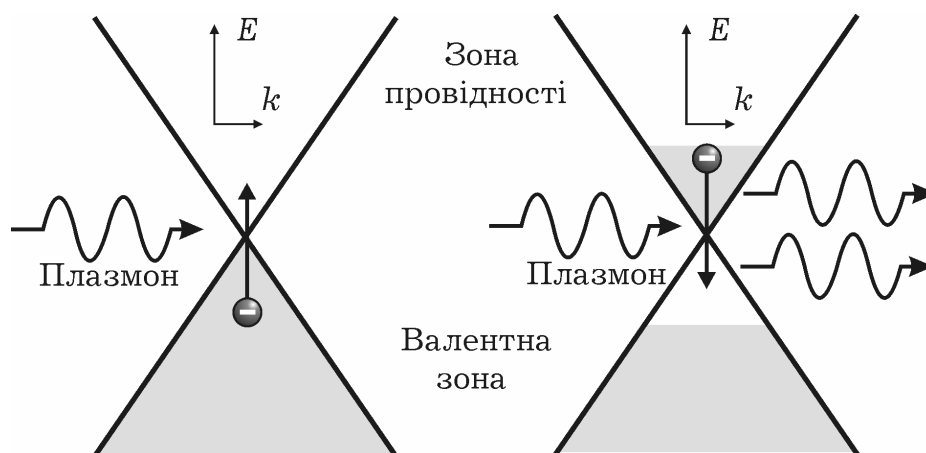


Рис. 8.9. Енергетична модель, що ілюструє механізм генерації плазмонів у графені

Основна відмінність полягає в низькій груповій швидкості плазмонів у графені в терагерцовому діапазоні й сильному обмеженні електромагнітного поля, пов'язаного з плазмонами поблизу шару графену, що дає істотно більші значення підсилення, ніж у традиційних напівпровідникових лазерах. Енергія електромагнітного поля в графені обмежена внаслідок малих поперечних розмірів його шару.

У роботі [247] подано модель поширення плазмонів у графені, яка враховує внутрішньодолинне розсіяння і плазмонне підсилення унаслідок стимульованої емісії; наведено результати моделювання характеристик лінії передачі, що є плазмонною структурою (рис. 8.10). Неоднорідний розподіл електронів і дірок у шарі графену забезпечується як за рахунок їх інжекції з n - і p -контактів структури, так і за рахунок внутрішньодолинного тунелювання у графені (якщо немає забороненої зони), а керування здійснюється за рахунок електростатичного зміщення

на затворах. Плазмонні хвилі, що виникають у шарі графену, локалізуються в діелектричній смузці, нанесеній на шар графену.

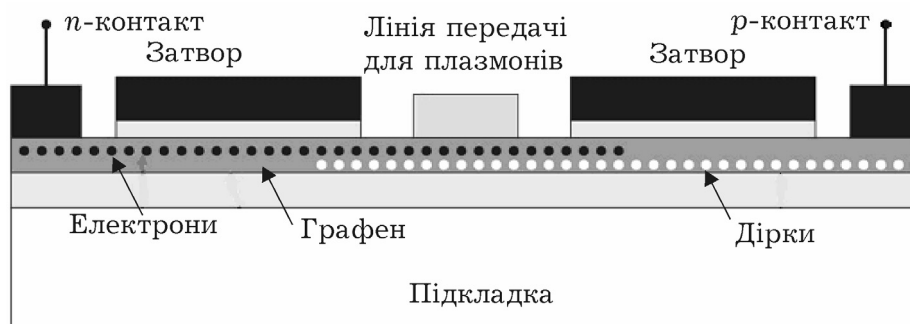


Рис. 8.10. Хвильоводна активна плазмонна структура

У подібній структурі (ширина діелектрика до 0,5 мкм за довжини лінії до 5 мкм, електронно-діркової концентрації 10^{10} см^{-2} і за низьких температур до 77 К) можливе підсилення сигналу в діапазоні частот 1...6 ТГц.

8.4. НАНОКОМПОНЕНТИ З ВИКОРИСТАННЯМ НАНОТРУБОК І НАНОПРОВІДНИКІВ

Структура нанотрубки після згортання смуги графенового шару в циліндричну поверхню без розривів характеризується хіральним вектором (n, m) , який вказує координати бензолового кільця, що поєднується з кільцем на початку координат, у разі згортання шару. Два типи нанотрубок – зигзагоподібні (*zig-zag*) з хіральним вектором $(n, 0)$ і в конфігурації крісла (*armchair*) з хіральним вектором (n, n) – мають, окрім осі симетрії, ще й площину симетрії, перпендикулярну осі нанотрубки. При цьому нанотрубки можуть мати металеву або напівпровідникову провідність.

Структуру транзистора на напівпровідниках показано на рис. 8.11 [249]. Товщина напівпровідників (до 10 у структурі) в транзисторі на полікристалічному кремнії досягає 50 нм [249]. Такі структури використовують у тривимірних інтегральних схемах, рідкокристалічних екранах, а також у «системах на кристалі».

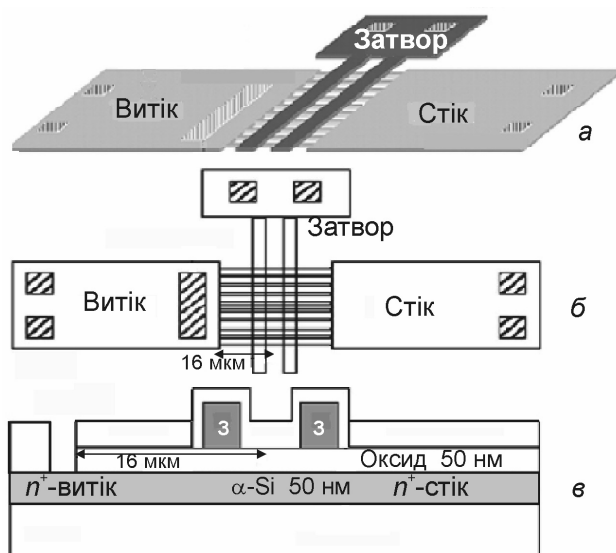


Рис. 8.11. Двозатворний транзистор на нанопровідниках

Транзистор на нанотрубках схематично зображено на рис. 8.12. Транзистор є структурою [251] на вуглецевій трубці (*CNT* – *carbon nanotube*), вбудованій в акцепторний легований витік і стік. Нанотрубки мають поперечний розмір від 1 до 10 нм. Модуляція провідності в одношаровій структурі нанотрубки, яка має характер провідності напівпровідника, здійснюється зовнішнім поперечним електричним полем.

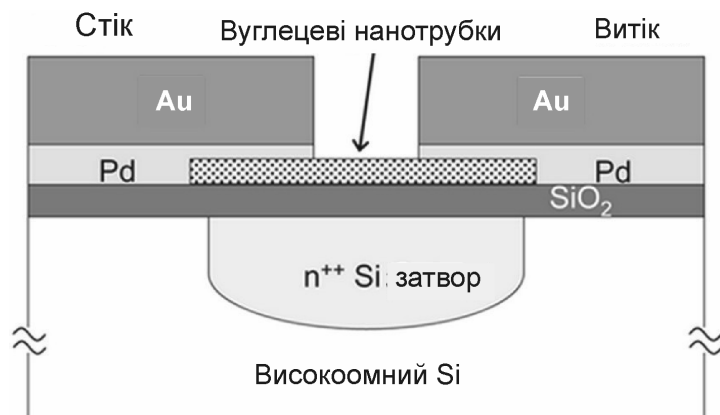


Рис. 8.12. Транзистор на нанотрубках

Коливання електронної плазми в нанотрубці квантовані й можуть бути описані квазічастинками – плазмонами, якщо припустити, що немає міжелектронних взаємодій, за яких колективні коливання плазми розглядаються як коливання вільного електронного газу.

Технологічно канал транзистора на нанотрубках може бути виконаний як одно-, дво- або тривимірна система. Так, у роботі [252] досліджуються властивості транзисторів на нанотрубках, що включають одиничну нанотрубку (одновимірна система), а також структури з нанотрубками, які створюють дво- і тривимірні системи. При цьому фізичні процеси для електронного газу можуть розглядатися як незалежні в кожній окремій нанотрубці. Тривимірні структури дозволяють набувати більших значень густини струму в транзисторі.

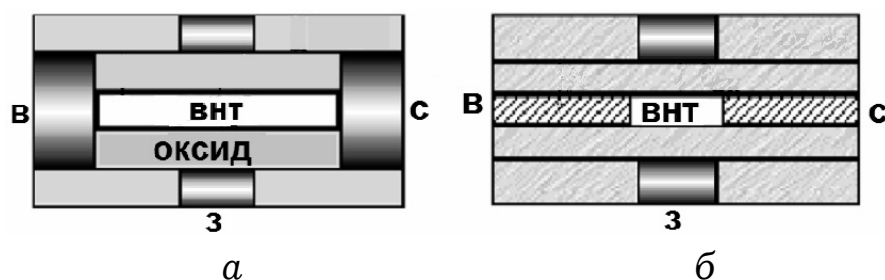


Рис. 8.13. Структури польових транзисторів з каналом на нелегованій (а) і ступінчасто легованій нанотрубці (б)

У роботі [253] запропоновано оригінальні конструкції польових транзисторів на нанотрубках з донорним легуванням. Отримані хімічним шляхом нанотрубки зі ступінчастим профілем легування (мінімум усередині нанотрубки) завдовжки 50 нм вбудовані в структуру транзистора так, що це дозволяє досягти ефективної довжини каналу 5 нм. Наведено дві конструкції транзисторів (рис. 8.13) з довжиною каналу 5 і 10 нм, властивості яких (табл. 8.2) дозволяють отримати унікальні частотні й часові характеристики. Зокрема, за досить високих значень крутизни гранична частота f_T перевищує 10 ТГц, якщо час прольоту носіїв у каналі становить 22 фс.

Останнім часом перспективними з погляду як технології, так і отримання привабливих вихідних характеристик, є польові транзистори на нанотрубках на кремнієвих підкладках [254–256].

Таблиця 8.2. Параметри транзисторів на нанотрубках

Ємність затвора, аФ	Час прольоту, фс	Довжина затвора, нм	Ширина затвора, нм	Крутизна, мСм	Гранична частота f_T , ТГц
0,7	22	5	50	63	14,5
1,25	32	10	100	88	11

Система нанотрубок (рис. 8.14) у транзисторі дозволяє збільшити струм через канал і напругу відсічення струму стоку, а також крутизну ВАХ. Використання паладієвих контактів зменшує паразитні опори стоку і витоку. Щільність нанотрубок у каналі становить приблизно 1...3 на 1 мкм, проте на знімку зі сканувального електронного мікроскопа видно неупорядкованість нанотрубок. Дефекти нанотрубок обмежують повторюваність параметрів транзисторів через флуктуації провідності.

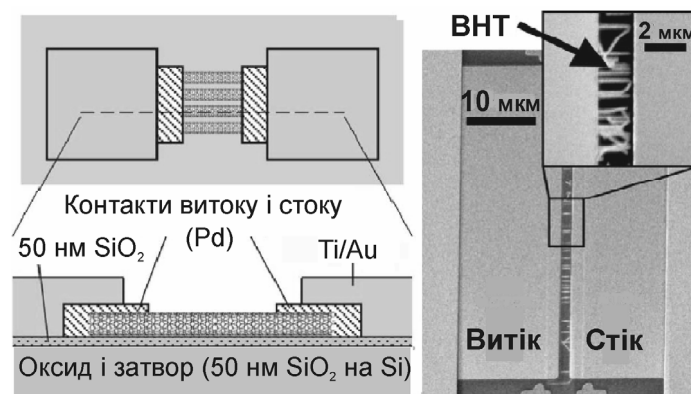


Рис. 8.14. Транзистор із системою нанотрубок [255]

Ще один приклад використання поєднання легованих і нелегованих нанотрубок у транзисторних структурах наведено в роботі [255]. Тут використовується система легованих нанотрубок для формування каналу транзистора в міжелектродному просторі й нелегованих нанотрубок діаметром до 2 нм під керувальним затвором завдовжки близько 30 нм і завширшки 60 нм. Така двозатворна структура (рис. 8.15) реалізує швидкодіючий інвертор. Щільність нанотрубок у шарі може досягати 250 на 1 мкм.

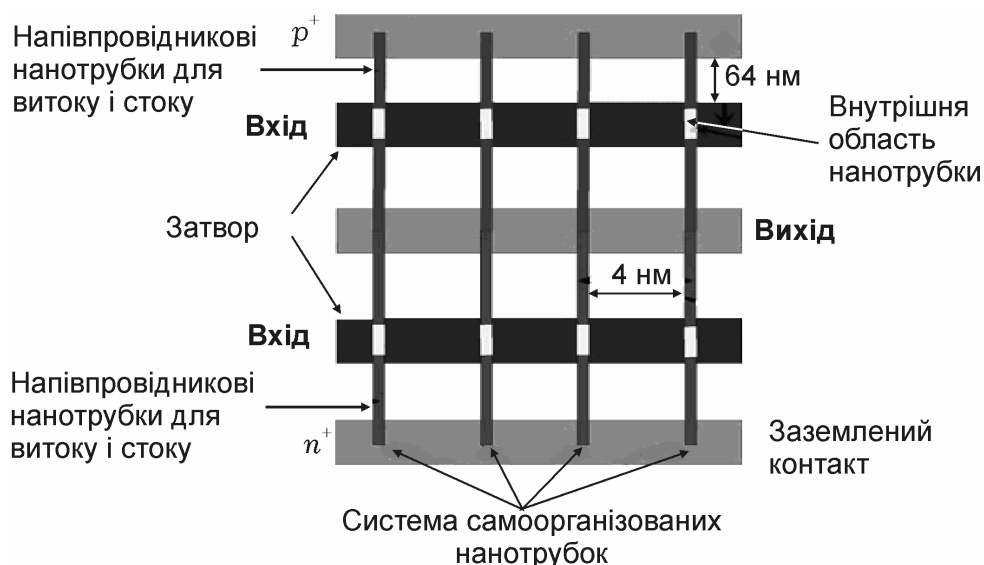


Рис. 8.15. Інвертор на транзисторах із системою легованих і нелегованих нанотрубок [256]

Критичним параметром для отримання стабільних характеристик залишається кількість самоорганізованих дефектних нанотрубок у системі. Як вже наголошувалося, деформації нанотрубок у процесі формування можуть приводити до помітної зміни величини провідності, а в деяких випадках і до зміни характеру провідності.

У роботі [257] описано структуру, експериментальні характеристики й аналітичну модель для пакета схемотехнічного проектування PSPICE польового транзистора на кремнієвих нанонитках з бар'єрними контактами Шотткі стоку і витоку. Крім того, особливістю конструкції транзистора є розміщення каналу у вигляді нанонитки на лицьовому, а ізольованого затвора на зворотному боці транзистора. Кремнієві нанонитки характеризуються високою рухливістю носіїв і провідністю, тому в пропонованій моделі нехтують спадом напруги в каналі. Для опису фізичних процесів на бар'єрних контактах використовується аналітична модель термоелектронної польової емісії для зворотних електричних зміщень і термоелектронної емісії для прямих зміщень.

Структуру такого транзистора і відповідну їй енергетичну діаграму зображено на рис. 8.16.

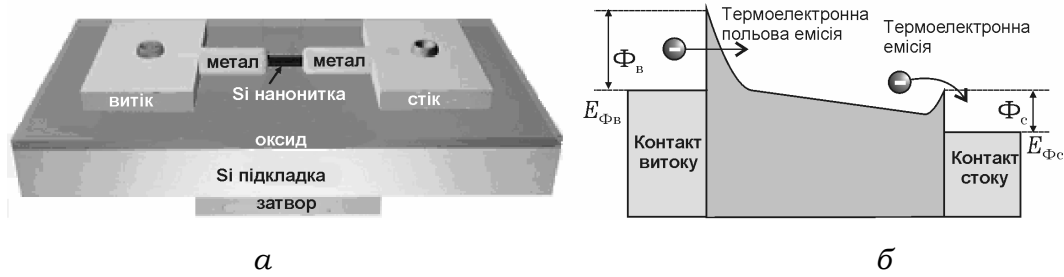


Рис. 8.16. Структура й енергетична діаграма транзистора з кремнієвими нанонитками

Рівняння для опису термоелектронної польової емісії мають такий вигляд:

$$I = SJ_s \exp\left(-\frac{eV}{E_t}\right); E_t = E'_0 \left[\frac{E'_0}{k_B T} - \text{th}\left(\frac{E'_0}{k_B T}\right) \right];$$

$$J_s = \frac{A^* T^2 (\pi E'_0)^{1/2}}{k_B T} \left[-eV + \frac{\Phi_b}{\text{ch}(E'_0 / k_B T)} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{\Phi_b}{E'_0}\right);$$

$$E'_0 = \frac{\hbar}{2(N_d / m^* \epsilon \epsilon_0)^{1/2}}; E_0 = E'_0 \text{cth}\left(\frac{E'_0}{k_B T}\right),$$

де e – заряд електрона; V – падіння напруги на бар'єрі Шотткі; S – площа каналу; A^* – константа Річардсона; Φ_b – висота бар'єра Шотткі; N_d – концентрація донорної домішки; m^* – ефективна маса електронів у нанонитці; $\epsilon \epsilon_0$ – діелектрична проникність нанонитки.

Зміна висоти бар'єра Шотткі унаслідок зовнішнього електричного поля визначається за формулою

$$\Phi_b = \Phi_{b0} - \sqrt{\frac{e \mathcal{E}_m}{4\pi \epsilon \epsilon_0}},$$

де Φ_{b0} – висота бар'єра Шотткі за відсутності електричного поля; \mathcal{E}_m – максимальне значення електричного поля контакту «метал–напівпровідник».

Одновимірне рівняння Пуассона для визначення Φ_b у донорно легованій нанонитці запишемо у вигляді

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} - \frac{\phi(x) - V_g + V_{bi}}{\lambda} = -\frac{e N_d}{\epsilon \epsilon_0},$$

де V_{bi} – вбудований потенціал; λ – ефективна довжина екранування, $\lambda = (\epsilon_s \epsilon_{ox} / t_{ox} t_s)^{1/2}$; ϵ_{ox} і t_{ox} – діелектрична проникність і товщина оксидного шару відповідно; t_s – товщина нанонитки.

Якщо потенціал апроксимувати параболічною функцією, розв’язок рівняння Пуассона може бути поданий виразом

$$\varphi(x) = \left[(V_{ds} + V_{bi} - \varphi_{s0})(e^{x/\lambda} - e^{-x/\lambda}) + (V_{bi} - \varphi_{s0})(e^{L/\lambda} - e^{-L/\lambda})(e^{(L-x)/\lambda} - e^{-(L-x)/\lambda}) \right],$$

де L – довжина каналу; $\varphi_{s0} = V_{gs} - V_{FB} - eN_d \lambda^2 / \epsilon \epsilon_0$; V_{FB} – потенціал плоских зон.

Диференціюючи вираз для потенціалу, можна знайти розподіл електричного поля $\mathcal{E}(x) = -d\varphi / dx$.

Максимальне значення електричного поля на контакті «метал–напівпровідник» для $x = 0$ можна знайти зі співвідношення

$$\mathcal{E}_m = \mathcal{E}(0) = C_1 V_{ds} + C_2 V_{gs} + C_3,$$

де C_1 , C_2 , C_3 – припасувальні параметри. Підставляючи останній вираз у формулу для φ_b , отримаємо

$$\varphi_b = \varphi_{b0} - (AV_{ds} + BV_{gs} + C)^{1/2},$$

де A , B , C – константи, які з урахуванням поверхневих станів [258] можуть бути визначені як

$$A = e^3 C_1 / 4\pi \epsilon \epsilon_0; \quad B = e^3 C_2 / 4\pi \epsilon \epsilon_0; \quad C = e^3 C_3 / 4\pi \epsilon \epsilon_0.$$

Експериментальні характеристики і результати моделювання транзистора на нанонитці у вигляді вихідних ВАХ і залежності висоти потенціального бар’єра контакту «метал–напівпровідник» від вихідної напруги подано на рис. 8.17, (експериментальні результати показані у вигляді символічних позначень).

Структура транзистора характеризується такими параметрами: довжина каналу – 20 нм, ширина каналу – 2 мкм, концентрація донорної домішки – $1,1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, товщина шару оксиду $t_{ox} = 100 \text{ нм}$. Напруга відсічення струму транзистора

становила $V_t = -2$ В. На рис. 8.17 помітна залежність висоти потенціального бар'єра від прикладеної живильної напруги транзистора.

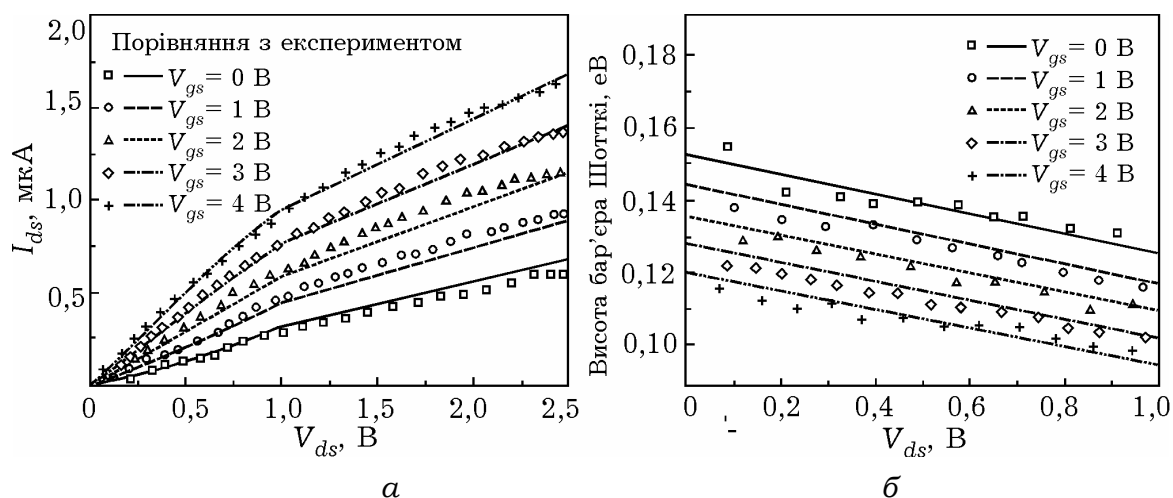


Рис. 8.17. Вихідні ВАХ (а) і залежність висоти потенціального бар'єра (б) «метал-напівпровідник» транзистора на нанонитці [258]

8.5. ПАСИВНІ КОМПОНЕНТИ НАНОІНТЕГРАЛЬНИХ СХЕМ: МІЖЗ'ЄДНАННЯ, ЛІНІЇ ПЕРЕДАЧІ, КОНДЕНСАТОРИ

У роботах [259–261] наведено приклади використання вуглецевих наноструктур як міжз'єднань і ліній передачі.

У роботі [259] розглянуто лінію передачі у вигляді «пачки» вуглецевих нанотрубок, що з характерними розмірами схематично показано на рис. 8.18. При цьому використовується поєднання металевих і напівпровідникових нанотрубок у «пачці», спільна їх кількість може сягати десятків. Змінюючи кількість і тип нанотрубок, досягають зміни їх провідності, а також ємнісних та індуктивних властивостей. Також запропоновано одновимірну модель поширення хвиль в описаній системі нанотрубок, аналогічну рівнянням довгих ліній, за припущення, що немає тунельних переходів електронів між окремими нанотрубками у пачці, що найчастіше виконується, оскільки провідність кожної окремої нанотрубки істотно більша від провідності між трубками.

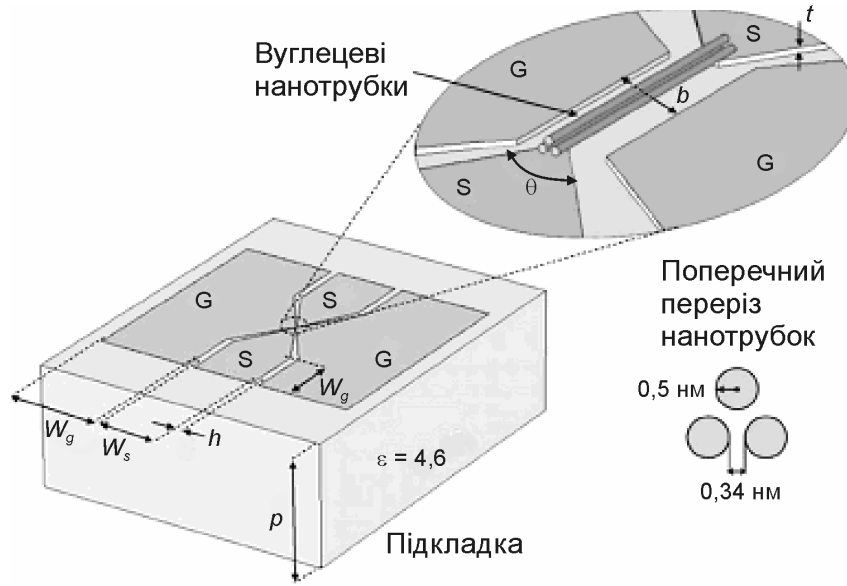


Рис. 8.18. Структура з лінією передачі у вигляді «пачки» нанотрубок

Для розподіленої одновимірної моделі лінії передачі з металевою і квазіметалевою провідністю для одиничної нанотрубки у припущенні виродження спіну можуть бути записані такі рівняння для заряду на одиницю довжини і для струму уздовж лінії передачі [259]:

$$\frac{\partial Q'_c}{\partial t} = - \frac{\partial I_c}{\partial z};$$

$$\frac{\partial I_c}{\partial t} = - \frac{4ev_F F}{h} - v_F^2 \frac{\partial Q'_c}{\partial z},$$

де v_F – швидкість Фермі, $v_F = 8 \cdot 10^5$ м/с; e – заряд електрона; h – стала Планка; F – результуюча сила, що діє на електрони. Ці сили можна подати у вигляді суми електромагнітних сил F_{em} і сил гальмування F_a , пов'язаних з дією різних механізмів розсіяння: $F = F_{em} - F_a$, де $F_a = mv/\tau$; τ – час релаксації. Якщо відомий струм у нанотрубці, швидкість може бути знайдена як

$$v = - \frac{hI_c}{4emv_F},$$

а враховуючи останні співвідношення,

$$F_a = - \frac{hI_c}{4ev_F \tau}.$$

Узагальнюючи наведені співвідношення, можна отримати рівняння для струму уздовж лінії в такому вигляді:

$$\frac{\partial I_c}{\partial t} = -\frac{4ev_F F_{em}}{h} - \frac{I_c}{\partial z} - v_F^2 \frac{\partial Q'}{\partial z}.$$

У роботі [259] отримано також рівняння для «пачки» нанотрубок, аналогічні за формою відомим телеграфним рівнянням у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial z} &= -C' \frac{\partial V}{\partial t}; \\ \frac{\partial V}{\partial z} &= -\frac{R'}{2n} I - \left(L'_e + \frac{L'_k}{2n} \right) \frac{\partial I}{\partial t}. \end{aligned}$$

Тут застосовано підхід, що використовує розподіл електрохімічного потенціалу V уздовж лінії передачі, а величини, які входять у рівняння, визначають за такими співвідношеннями:

– електрохімічний потенціал:

$$V = V_s + \frac{Q'}{2nC'_q},$$

де V_s – електростатичний потенціал, n – кількість нанотрубок у пачці, $C'_q = \frac{2e^2}{hv_F}$, $L'_k = \frac{h}{2e^2v_F}$, $R' = \frac{h}{2e^2v_F\tau}$. Тут використовуються визначені поняття квантової ємності й кінетичної індуктивності;

– електромагнітні параметри лінії – ємність та індуктивність лінії у вигляді «пачки» нанотрубок:

$$C'_e = \frac{2\pi\epsilon\epsilon_0}{\text{ch}^{-1}(d/a)}; \quad L'_e = \frac{\mu_0}{2\pi} \text{ch}^{-1}\left(\frac{d}{a}\right),$$

де a – радіус нанотрубки; d – відстань від «пачки» нанотрубок до пластини заземлення (геометричні розміри показано на рис. 8.19). Крім того, в останніх співвідношеннях використовуються магнітна і діелектрична проникність середовища поза «пачкою» нанотрубок.

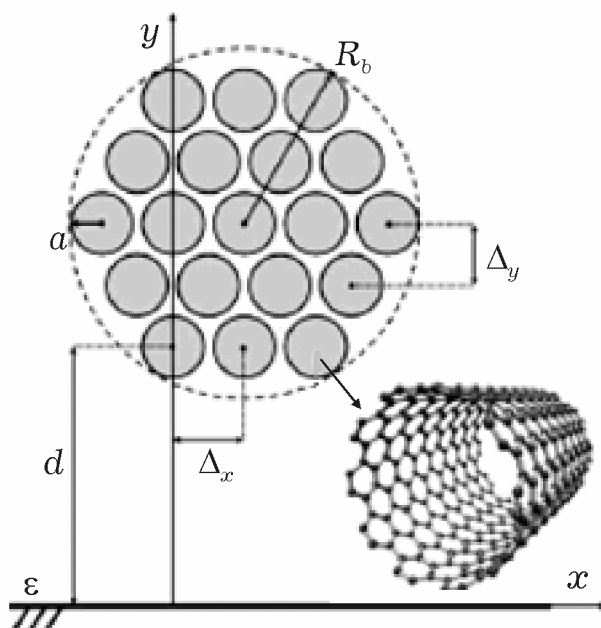


Рис. 8.19. Пачка нанотрубок з металевою провідністю

У роботі [260] запропоновано конструкції міжз'єднань у вигляді «пачки» однорідних нанотрубок, придатних, зокрема, для комутації не лише планарних, але і багат шарових (вертикальних) наноструктур (рис. 8.20). Діаметр нанотрубок у такій структурі може досягати десятків нанометрів, а висота – сотень мікрометрів, що дозволяє здійснювати багат шарову компоновку наносхем.

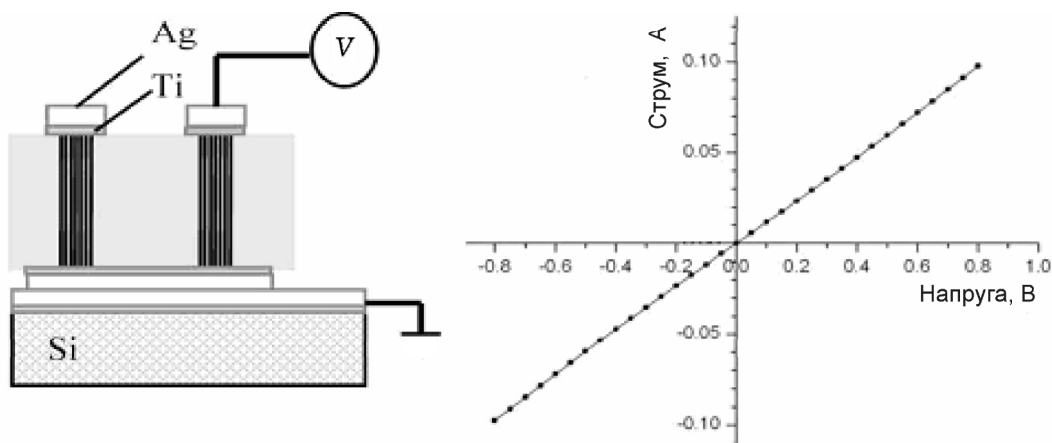


Рис. 8.20. Тестова структура у вигляді вертикальних нанотрубок і її ВАХ

У тестовій структурі на рис. 8.20 середовище довкола системи нанотрубок між контактами заповнене полімерним матеріалом бензоциклобутаном. Системи вертикальних нанотрубок

мають абсолютно лінійну ВАХ. За довжин у сотні мікрметрів характерні значення опору наведеної системи нанотрубок становлять одиниці й десятки Омів.

Приклад використання нановолокон для між'єднань, а також виготовлення контактів на кристалі наведено в роботі [261]. Принципова відмінність полягає у використанні планарних графітових структур у вигляді нановолокон (рис. 8.21). Однією з основних вимог до між'єднань є сталість провідності в широкому діапазоні температур.

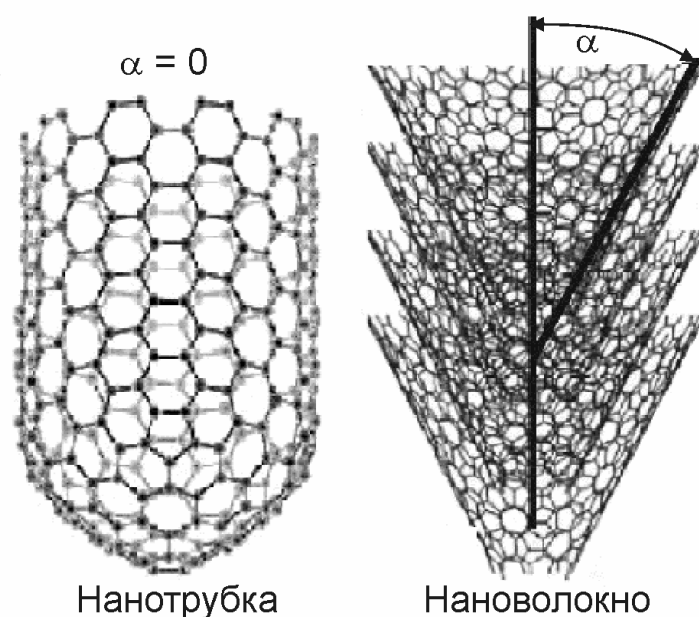


Рис. 8.21. Структурні особливості вуглецевої нанотрубки і нановолокна

Наведені на рис. 8.22 температурні залежності провідності для чотирьох тестових нановолоконних структур на підкладці з оксиду кремнію демонструють монотонне зростання до приблизно 150 К і відносну її постійність до 350 К. Тестові структури виготовлені методом плазмово-хімічного випаровування. Нановолокно може бути отримане у вигляді шару завтовшки 30...40 нм на контакт з шаром титану, напиленого на кремнієву підкладку.

У роботі [259] наголошується, що фізичною моделлю для подібних структур може бути стрибковий механізм провідності. Двовимірною матрицею з нановолокон за температурними харак-

теристиками демонструє переваги порівняно з між'єднаннями на нанотрубках і нанонитках.

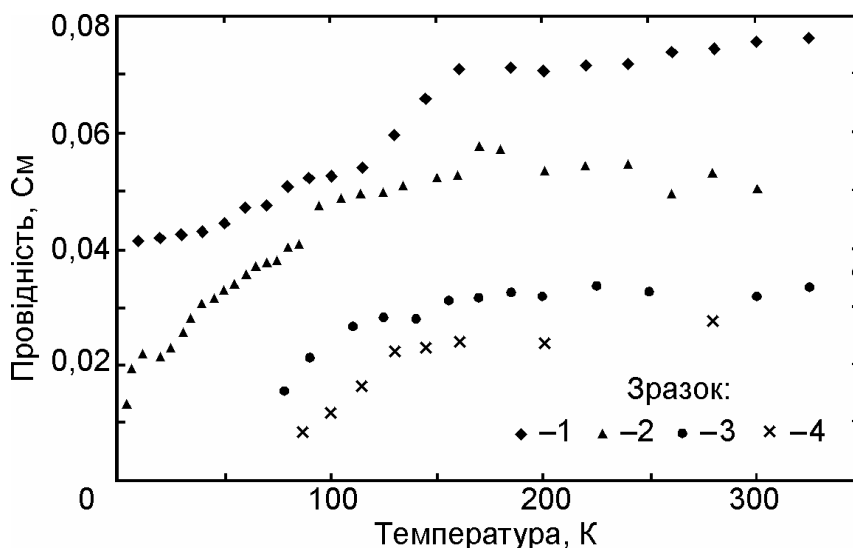


Рис. 8.22. Температурні залежності провідності зразків вуглецевого нановолокна [259]

У статті [262] подано приклади використання вуглецевих нанотрубок як квантових конденсаторів для нелінійних кіл терагерцового діапазону. Квантові конденсатори є структурою (рис. 8.23), подібною до транзисторної. Компонування структури передбачає розміщення на підкладці до 100 вуглецевих нанотрубок. За допомогою керівного електрода є можливість реалізувати перебудовуваний конденсатор (варактор) у широкому діапазоні живильної напруги різної полярності. Є можливість перестроювання ємності конденсатора в атофарадах майже на порядок у разі зміни електричного зміщення від -2 до $+2$ В. Характерними особливостями конденсаторів є малі теплові втрати і високі швидкості перемикання унаслідок балістичного перенесення електронів у нанотрубці, проте залишається проблема мінімізації паразитних параметрів структури. Технологічно цьому сприяє вживання «*high-k*»-матеріалів – діелектриків, які мають статичну діелектричну проникність більшу, ніж оксиду кремнію ($\epsilon = 3,9$). До таких матеріалів належать Al_2O_3 , Ti_2O_3 , ZrO_2 , Ta_2O_5 , HfO_2 та ін.

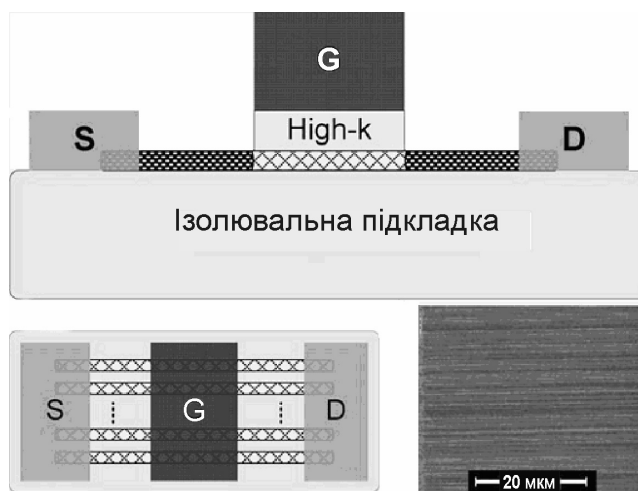


Рис. 8.23. Структура квантового конденсатора

У роботі [263] розглянуто використання вуглецевих нанотрубок з характерними розмірами (рис. 8.24) як дипольної антени у вигляді «пачки» нанотрубок круглої або прямокутної форми, де радіус пачки R (або висота і ширина для прямокутної «пачки») становлять десятки нанометрів, а довжина L – десятки мікрометрів. Для створення антенних пристроїв використовують нанотрубки типу «крісло» з металевою провідністю.

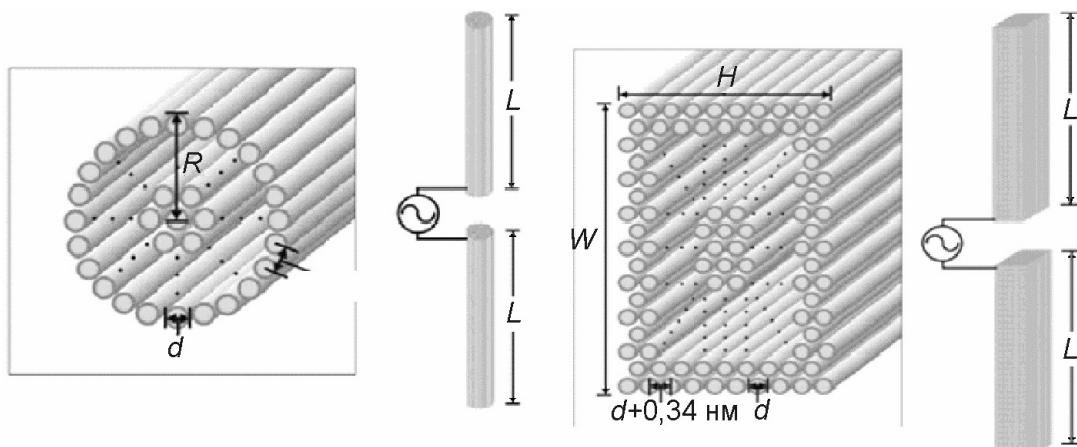


Рис. 8.24. Дипольні антени на нанотрубках

Одним із найважливіших параметрів квантових систем, як уже зазначалося для тунельних ефектів, є квантова одиниця опору: $h/e^2 = 25,8$ кОм. На відміну від звичайного резистора, квантовий опір не є обернено пропорційним площі поперечного перерізу і набагато менший, ніж для традиційного

металевого резистора з нанорозмірами. Крім того, в таких хвилеводах можна нехтувати скін-ефектом аж до терагерцового діапазону частот, оскільки струм електронів пов'язаний з π -зонами атома вуглецю, подібно до того, як це відбувається в графітовому листі. Отже, загальні втрати потужності в описуваних антенах істотно менші, ніж у традиційних. Одним із недоліків таких антен є високий характеристичний опір (до 100 кОм), що може утруднювати узгодження зі стандартними пристроями з хвильовим опором 50 Ом. У роботі [263] показано, що антени у вигляді «пачки» вуглецевих нанотрубок мають випромінювальну здатність на 30...40 дБ вищу, ніж антени на одиничних нанотрубках.

Однією з невирішених проблем у сфері нанотехнологій залишається забезпечення електричного контакту наноелектронних пристроїв з макроскопічним рівнем без істотних втрат у можливій густині струму, досяжній на нанорівні. Поки контакт з усіма нанотрубчастими і нанодротяними пристроями реалізують за допомогою створення контактних площадок, але цей шлях не може бути ефективним для об'єднання багатьох наносистем. Справді, топологічні розміри наносистем істотно менші, ніж здатність сучасного літографічного устаткування, і відносно низька щільність розміщення контактних площадок перекреслює переваги можливої щільності упаковки наноелектронних елементів.

Одне з можливих вирішень проблеми полягає в організації бездротового зв'язку з нанопристроями [264]. Якщо кожен сполучний дріт пов'язаний з нанотрубкою різної довжини (отже, різної резонансної частоти), то проблема мультиплексування сигналів входу/виходу може бути перенесена з просторової області в спектральну. Отже, послаблюючи вимоги до високої роздільної здатності літографічного процесу для сполучних дротів можна істотно знизити вартість наноелектронних виробів. Ідея бездротових з'єднань досить універсальна

і легко масштабується (рис. 8.25). За таким самим принципом можна організовувати електроживлення нанопристроїв, причому наноантени використовуватимуться як ректени (випрямні антени), в яких роль випрямлячів виконують усе ті ж нанотрубки із вбудованим дефектом атомної сітки. Подібні модифікації наноструктур дозволяють перейти від пасивних наноантен до активних рішень, що мають, окрім просторово-вибіркових і частотно-селективних властивостей, ще й можливість прямого підсилення прийнятих сигналів.



Рис. 8.25. Наносистема з решітками наноантен для бездротового зв'язку із взаємодіючими макропристроями

Хвильові процеси в нанотрубках можна аналізувати, використовуючи теорію довгих ліній [265] і подання цих ліній у вигляді схемної моделі із зосередженими параметрами. Особливість електричних властивостей вуглецевих нанотрубок може бути врахована включенням в їх еквівалентну електричну схему, окрім розподілених по довжині провідника традиційної ємності й індуктивності, двох додаткових розподілених елементів: кінетичної індуктивності та квантової ємності.

Кінетична індуктивність характеризує ефект «запаса-
сання» струму в нанопровіднику не за рахунок магнітного поля,

а внаслідок інерції руху носіїв заряду. Електрони реагують на прикладене електричне поле не миттєво, а з деякою затримкою, тому під дією електричних полів, що періодично змінюються, відповідні варіації швидкості електронів відстають за фазою від змін напруженості електричного поля. Зовні ці процеси аналогічні наявності індуктивності. Кінетична енергія, зумовлена переміщенням електронів під час проходження струму [266], може бути описана виразом

$$K = \int_V n \frac{mv^2}{2} dV,$$

де n – концентрація електронів у провіднику; m і v – маса і швидкість їх руху відповідно. У результаті інтегрування за об'ємом провідника нескладно отримати

$$K = n \frac{mv^2}{2} V = n \frac{mv^2}{2} Sl,$$

де S – площа поперечного перерізу провідника; l – довжина провідника.

Енергія, пов'язана з інерційністю руху електронів, подібна до тієї, що накопичується в магнітному полі провідника зі струмом. Це дозволяє зіставити магнітну енергію індуктивності з інерцією зарядів:

$$\frac{1}{2} L_K i^2 = \int_V n \frac{mv^2}{2} dV = n \frac{mv^2}{2} Sl.$$

Якщо врахувати вираз для струму $i = envS$, то отримаємо вираз для кінетичної індуктивності у такому вигляді:

$$L_K = \frac{ml}{ne^2 S}.$$

Для макроскопічних провідників кінетична індуктивність завжди набагато менша від звичайної «магнітної» індуктивності. У тонких провідниках з малим поперечним перерізом кінетична індуктивність переважає.

Ця обставина, а також те, що розміри поперечного перерізу провідника співмірні з квантово-механічною довжиною

хвилі електрона, по суті перетворює провідник в одномодовий хвилевід для електронних хвиль.

Кінетична індуктивність для одновимірних хвилевідних систем, що каналізують електронні хвилі, в перерахунку на одиницю довжини провідника описується спрощеною залежністю [267]

$$L_{\kappa} = \frac{h}{2e^2 v_F},$$

де h – стала Планка; v_F – швидкість Фермі для носіїв заряду, $v_F = \sqrt{2E_F / m}$.

Для вуглецевих нанотрубок у статті [266] вказано, що $v_F = 8 \cdot 10^5$ м/с, відповідно питома лінійна (погонна) кінетична індуктивність $L_{\kappa} = 16$ нГ/мкм.

Поняття *квантової ємності* було введено 1987 р. Сержем Лур'є (*Luryi*) [267] для визначення ємності шару двовимірного електронного газу $C_q = e^2 D$, де D – двовимірна густина станів системи. У свою чергу, для двовимірного електронного газу $D = 4m^* \pi / h^2$. Щоб внести до квантової фермі-системи нову частинку (відповідно до принципу Паулі), її енергія має перевищувати рівень Фермі. В одновимірних системах це може бути прирівняно до питомої енергії на одиницю довжини. Від цієї питомої енергії може бути розрахована погонна ємність на одиницю довжини, яку називають квантовою ємністю. Для одновимірного випадку нанотрубок у роботі [266] квантову ємність на одиницю довжини визначають як

$$C_q = \frac{2e^2}{h v_F}$$

для швидкості Фермі, для графену і вуглецевих нанотрубок питома квантова ємність сягає 100 аФ/мкм.

Формування дипольної антени з вуглецевих нанотрубок зображено на рис. 8.26.

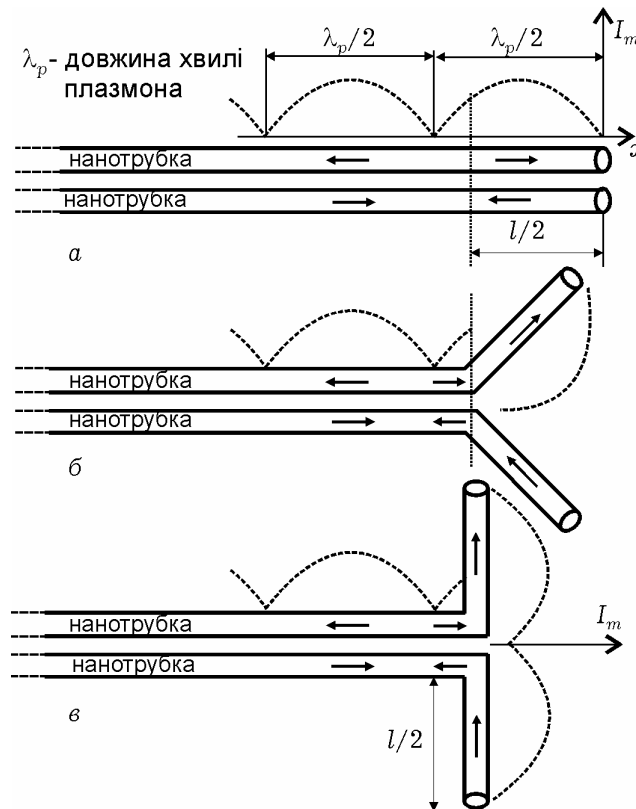


Рис. 8.26. Формування дипольної антени з двопровідної лінії на нанотрубках (штрихова лінія – розподіл амплітуди стоячої хвилі струму)

У двопровідній лінії на нанотрубках магнітною індуктивністю можна нехтувати через її мале значення. Схемну модель такої лінії показано на рис. 8.27, а [266].

Електростатичну ємність двопровідної лінії можна розрахувати за формулою [8.29]

$$C_{ES} = \frac{\pi e}{\text{ch}^{-1}(W/d)} \approx \frac{\pi}{\ln(W/d)}.$$

Слід взяти до уваги, що у вуглецевих нанотрубках завдяки їх зонній структурі й моментам спінів електронів є чотири квантові канали поширення електронів [268] (чотири енергетичні стани електронів провідності): по два канали для двох станів спіну. Кожен із цих каналів має власну кінетичну індуктивність і квантову ємність. Усі чотири канали характеризуються спільною електростатичною ємністю щодо металевої підкладки, що істотно впливає на радіочастотні властивості нанопровідників (рис. 8.27, б) [268].

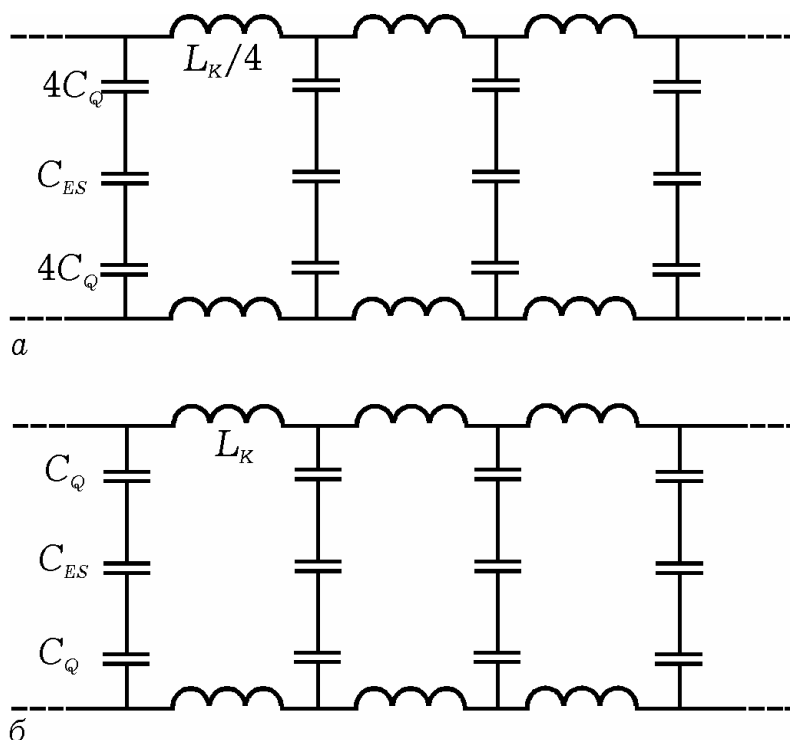


Рис. 8.27. Схемні моделі двопровідної лінії передачі на нанотрубках без урахування спіну електронів (а) та з урахуванням спіну (б)

Оскільки квантові канали паралельні, результуюча кінетична індуктивність лінії буде в чотири рази нижчою, ніж в одноканальному трактуванні, а квантова ємність – у чотири рази вищою. Відповідно, приблизно до $6,45 \text{ кОм}$ ($h/4e^2$) зменшиться і квантовий опір змінному струму. З урахуванням цього характеристичний імпеданс Z_c і хвильову швидкість v_p можна подати у такому вигляді [266]:

$$Z_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{R + j\omega L_K / 4}{j\omega C}}; \quad v_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{(L_K / 4)C}},$$

де $(C)^{-1} = (C_{ES})^{-1} + (8C_Q)^{-1}$, R – активний опір окремо взятої нанотрубки на одиницю довжини. Індекс « p » для хвильової швидкості позначає плазмон – квазічастинку, яка відповідає колективним коливанням вільного електронного газу, в цьому разі – одновимірного. Відповідно до статті [266] довжина плазмонної хвилі приблизно в 100 разів менша від довжини електромагнітної хвилі у вільному просторі для тієї самої частоти. Як відомо,

швидкість хвилі для традиційної двопровідної лінії передачі не залежить від відстані між дротами і дорівнює швидкості світла. Під час використання нанотрубок інтервал між ними помітно впливає на швидкість поширення електромагнітної хвилі внаслідок зміни загальної ємності лінії передачі, що істотно змінює поточний розподіл струму.

Одним зі способів зниження втрат у наноантенах є використання досить високої частоти електромагнітних коливань. Розрахунки умов поширення хвилі в пасивній двопровідній нанолінії передачі без дисперсії згідно зі статтю [266] дозволяють математично сформулювати обмеження $\omega L_k/4 \gg R$: якщо $R = 10$ кОм/мкм, низькі втрати є досяжними для частотного діапазону вище 400 ГГц.

8.6. СПІНТРОННІ СТРУКТУРИ

На відміну від електроніки, що використовує властивості електрона як зарядженої частинки, спінтроніка (від *SPIN-Transport electrONICS*) ґрунтується на використанні квантово-механічної характеристики електронів – спіну. У компонентах спінтроніки струм створюється електронами з однаковими спінами (спіновий струм), для отримання якого потрібно поляризувати спіни, упорядкувавши їх в одному напрямку. При цьому час життя спіну має бути досить великим, щоб передати його на потрібні відстані. Такі властивості притаманні феромагнетикам, в яких власне (внутрішнє) магнітне поле може в сотні й тисячі разів перевищувати зовнішнє магнітне поле, що його викликало. Це може бути пов'язано з обмінною взаємодією, яка виникає у разі перекриття хвильових функцій електронів, що належать сусіднім атомам кристалічної ґратки, а також некомпенсованих магнітних моментів спінів валентних електронів. Компоненти спінтроніки можуть мати властивості пам'яті, високу швидкість перемикавання (декілька пікосекунд) і споживати мало енергії, оскільки переверот спіну

фактично не вимагає витрат енергії, а в проміжках між операціями спінтронний пристрій може відключатися від джерела живлення. У компонентах спінтроники може бути використаний ефект гігантського магнітоопору (*Giant Magneto Resistance* – *GMR*), що спостерігається в штучних тонкоплівкових матеріалах, складених з феромагнітних і немагнітних шарів, що чергуються. Також використовують явище магнітного тунелювання (*Magnetic Tunnel Junction* – *MTJ*), що виявляється в елементах із двох шарів феромагнетика, розділених ізолятором. Як діелектрик зазвичай використовують оксид алюмінію (його товщина настільки мала (менше 2 нм), що електрон може просочуватися через цей бар'єр), а опір змінюється зовнішнім магнітним полем. На рис. 8.28 показано тришарові плівки з ефектом *GMR* і механізм розсіювання спіну, що зумовлює різну провідність для паралельної (а) й антипаралельної (б) орієнтації векторів намагніченості [269].

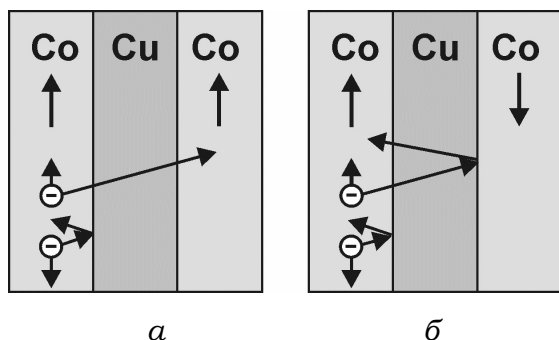


Рис. 8.28. Механізм провідності в багатошарових магнітних плівках

уподовж p_x , спіни електронів з $p_y > 0$ повертаються вгору, а з $p_y < 0$ вниз [270]. Спін-орбітальна взаємодія (рис. 8.29, б) дозволяє «сортувати» потік електронів за спіном: електрони зі спіном «вгору» розсіюються на дефектах і домішках кристалічної ґратки переважно вліво, а електрони зі спіном «вниз» – вправо у напрямку руху.

Застосовуючи різні матеріали і структури, можна використовувати ефект керування потоком електронів, що розрізняються за спіном. Механізм спінового ефекту Холла ілюструє рис. 8.29, а: за наявності електричного поля \mathcal{E}_x , коли електронний розподіл Фермі зміщений

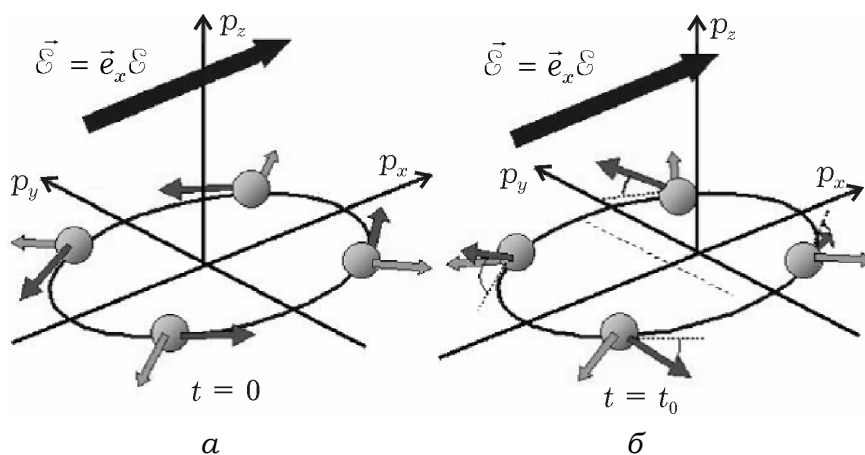


Рис. 8.29. Механізми спінового ефекту Холла
і «сортування» електронів за спіном

Розвиток спінтроніки пов'язаний з пошуком матеріалів, які б мали як властивості феромагнетиків, так і напівпровідників, що складно через значну відмінність у кристалічній структурі й характері хімічних зв'язків. Феромагнітні напівпровідники, з одного боку, були б джерелами спін-поляризованих електронів, а з другого – легко інтегрувалися б із традиційними напівпровідниковими пристроями. Ідеальний феромагнітний напівпровідник повинен мати точку Кюрі (температура, за якої феромагнетик втрачає свої властивості) вищу за кімнатну температуру і допускати створення зон із n - і p -провідністю в одному монокристалі.

Завдання зміни магнітного моменту електрона за допомогою електричного поля без прикладання магнітних полів у напівпровідниках було вирішено в роботі [271] для GaAs з товщиною плівки в декілька мікрон за температури близько 30 К. Це відкриває можливості створення нового елемента для перетворення інформації, коли намагніченість змінюється під дією електричної напруги, і навпаки. Дослідженнями виявлено ефект Холла [272] у плівках завтовшки 1,5 мкм у напівпровіднику ZnSe, легованому атомами хлору за кімнатної температури.

Магнітні властивості магнітних атомів зумовлені d -орбіталями, водночас напівпровідники утворюються з атомів із зовнішніми s - або p -орбіталями. Створення напівпровідників

із властивостями феромагнетика утруднене через те, що введення магнітних атомів у кристалічну ґратку напівпровідника значно погіршує їх магнітні характеристики.

Для створення гібридного спін-електронного пристрою [273] можна використовувати структуру, показану на рис. 8.30. Електрони, інжектвані з емітера, крізь шар магнітного матеріалу F входять у кремній вже поляризованими за спіном. У колектор електрони потрапляють, минаючи ще один шар магнітної речовини, який відіграє роль аналізатора спіну: електричний опір переходу різко зростає, якщо поляризація спіну електронів протилежна напрямку намагніченості в аналізаторі.

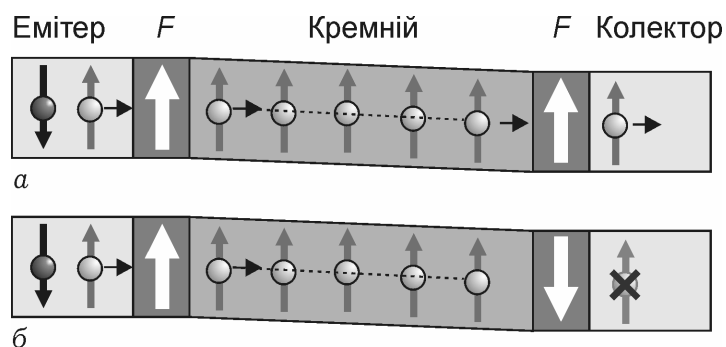


Рис. 8.30. Інжекція спінових струмів у кремній: F – шари магнітної речовини, що діють як поляризатор спінів і аналізатор

Отже, для створення спінового транзистора слід використовувати три основні елементи: емітер для електричного інжектування спін-поляризованих електронів у напівпровідник, зовнішню напругу, що керує спіновим струмом у напівпровіднику, і прецизійний аналізатор результуючого спінового струму.

У роботах [274; 275] об'єктом дослідження є спіновий вентиль (*spin valve*) (рис. 8.31). У найпростішому випадку він складається з двох феромагнітних шарів, розділених надтонким проміжком (спейсером), з немагнітного металу або діелектрика (спейсер потрібний, щоб запобігти прямій обмінній взаємодії між феромагнітними шарами. Перенесення електронів через металевий спейсер відбувається в балістичному (без зіткнень) режимі, а через діелектричний – у режимі тунелювання).

Один із феромагнітних шарів (його називають вільним (*free*)) має малу енергію анізотропії й легко змінює напрямок намагніченості під дією зовнішнього магнітного поля відповідної орієнтації або під час протікання струму. Інший феромагнітний шар (його називають закріпленим (*pinned*)) має істотно більшу енергію анізотропії і перемикається (мінє напрямок намагніченості) у набагато сильніших полях.

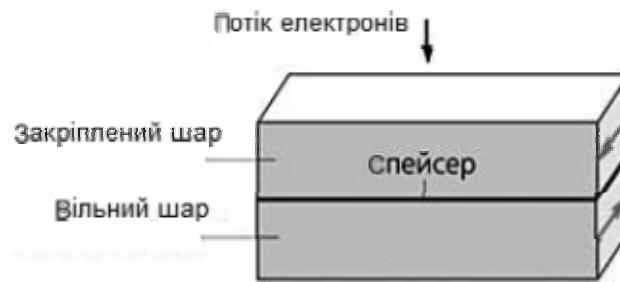


Рис. 8.31. Схема вентиля спіну
(стрілками показано напрямки намагніченості в шарах)

Коли потік електронів рухається із закріпленого шару в антипаралельно орієнтований вільний, останній у разі перевищення вказаного порогу стрибком перемагнічується з виникненням паралельної конфігурації [275]. Це виявляється у стрибкоподібному зменшенні опору магнітного переходу, що за заданого значення струму означає також стрибкоподібне зниження напруги на переході. Перенесення електронів під час протікання електричного струму в феромагнітному провіднику супроводжується перенесенням потоку спінового моменту кількості руху і пов'язаного з ним потоку магнітного моменту. У такому потоці напрямку магнітного спінового моменту електронів паралельний напрямку магнітного моменту ґратки, оскільки це відповідає мінімуму енергії sd -обмінної взаємодії. Під час переходу електронів з одного феромагнітного шару спінового вентиля в інший, що має іншу орієнтацію магнітного моменту ґратки, паралельність порушується й електрон змінює орієнтацію спіну. Паралельність відновлюється на малій відстані від межі поділу між феромагнетиками у шарі завтовшки близько 1 нм. Цей процес супроводжується передаванням спінового моменту кількості

руху від електронів до ґратки. При цьому навіть за колінеарної орієнтації намагніченості обох шарів у вільному шарі є флуктуації намагніченості. Спін електронів, що входять у вільний шар, має як поздовжню, так і поперечну компоненти. Оскільки значення передаваного в процесі взаємодії моменту пропорційне густині струму через перехід, за певної густини струму виникає нестійкість флуктуацій намагніченості ґратки, яка й спричиняє перемикання.

У роботі [275] подано фізичну інтерпретацію вказаного ефекту, яка зводиться до двох механізмів. Згідно з теорією Слончевського–Берже під час проходження спін-поляризованого струму через межу двох неколінеарних феромагнетиків відбувається передача обертального моменту (*spin torque*) від електронів магнітній ґратці, оскільки електрони, переходячи в середовище з іншим напрямком осі квантування спіну, втрачають поперечну, перпендикулярну до нового напрямку цієї осі, компоненту спіну, яка й віддається ґратці. За досить великої густини струму флуктуації стають нестійкими й їх наростання зумовлює перемагнічування вільного шару.

Інша модель враховує інжекцію нерівноважних спінів із закріпленого шару у вільний шар, тому поблизу межі між цими шарами, а також поблизу межі між вільним і немагнітним шаром виникають області нерівноважної спінової поляризації. Ширина цих областей визначається довжиною спінової дифузії й на порядок перевищує довжину релаксації поперечної складової намагніченості. Внаслідок існування *sd*-обмінної взаємодії між електронами й магнітною ґраткою наявність таких областей може як зменшувати, так і збільшувати магнітну енергію переходу залежно від орієнтації намагніченості та від параметрів магнітних шарів. Як наслідок, за досить великої густини струму початкова магнітна конфігурація може виявитись енергетично невигідною, що приведе до нерівноважного фазового переходу зі зміною конфігурації структури. Практичне використання описаного ефекту може бути пов'язане з магнітним записом

інформації спін-поляризованим струмом. Системний виклад фізичних процесів і моделей у спінтронних елементах надано в роботі [276].

Важливим етапом у розвитку спінтроніки стало вивчення тунельного магнетоопору в магнітних тунельних переходах, утворених феромагнітними електродами з різними електричними опорами з паралельною й антипаралельною зорієнтованістю магнітних моментів. Магнітні тунельні переходи, здатні перемагнічуватися за рахунок перенесення спіну, можуть служити основою для перспективної магнітної пам'яті з малим часом доступу і низьким енергоспоживанням. Розвиток напівпровідникової електроніки пов'язаний [276] з розробкою гібридних структур, які об'єднують феромагнітні метали з немагнітними напівпровідниками, отриманням феромагнітних напівпровідників (зокрема, $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, який, проте, має низьку температуру Кюрі – 170 К), а також структур, що використовують спіновий ефект Холла в немагнітних провідниках.

Однією з проблем спінтроніки є питання про час спінової когерентності, оскільки, якщо цей час дуже малий, то розорієнтування спінів приводить до втрати інформації, яку переносить кожний спін [277]. Вимірювання часу спінової когерентності за кімнатної температури показали, що в напівпровідниках він на декілька порядків більший (понад 100 нс), ніж у металах (0,1...20 нс), зазвичай використовуваних у спінових мультишарах. Тому «напівпровідникова» спінтроніка привабливіша і реалістичніша, ніж «металева». У наш час триває активна робота над створенням *DMS* (*Diluted Magnetic Semiconductors* – розріджених магнітних напівпровідників). Попри виграш у часі спінової когерентності, більшість досліджуваних *DMS* мають досить низькі температури Кюрі, що обмежує їх практичне використання. Цей недолік може бути усунений у разі переходу до наноструктур *DMS*. Наноструктуризацію напівпровідника збільшує розчинність домішки перехідних металів у його крис-

талічній ґратці до бажаних 1...2 %, які забезпечують магнітовпорядкований стан.

У статті [240] зазначено, що можна використовувати як спітронні компоненти поєднання напівпровідникових і молекулярних структур. Як бістабільну систему можна використовувати молекулу ротаксану (рис. 8.32), структуру якої розглядають як аналог нанопровідника.

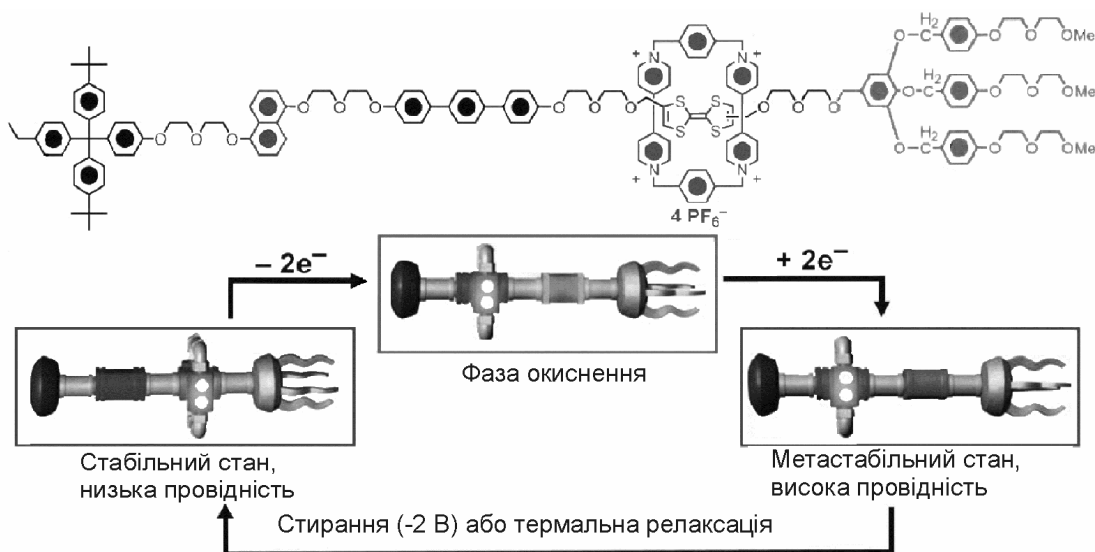


Рис. 8.32. Механізм перемикання молекули ротаксану

Усередині молекули є одновимірний компонент з π -зв'язком, пов'язаний з кільцем. Механізм перемикання передбачає обмін двома електронами й перехід через фазу окиснення зі стабільного стану (з низькою провідністю) у стан з високою провідністю, при цьому внаслідок кулонівського відштовхування відбувається переміщення кільця. Процеси перемикання можуть стимулюватися, наприклад, зовнішнім електричним полем.

Мінімальне електричне зміщення, що стимулює процеси перемикання, становить 0,8 В, а час – 0,1 пс. Проте є безліч обмежень, що перешкоджають створенню подібних наноконпонентів, серед них вплив температурних і паразитних ефектів під час вбудовування молекул ротаксану у функціональні наносистеми.

8.7. ЕЛЕМЕНТИ ПАМ'ЯТІ НА НАНОКОМПОНЕНТАХ

Як уже зазначалося, одноелектронні транзистори можуть перебувати у двох станах, один з яких пов'язаний з кулонівською блокадою, а другий – з протіканням струму. Це дозволяє розглядати їх як перспективні елементи швидкодіючої й енергетично економічної пам'яті для електронних обчислювальних систем.

Елемент пам'яті на подвійних одноелектронних транзисторах описаний в роботі [278]. Структуру елемента пам'яті на одноелектронних транзисторах, що реалізують три квантових біти (*qubits*), показано на рис. 8.33.

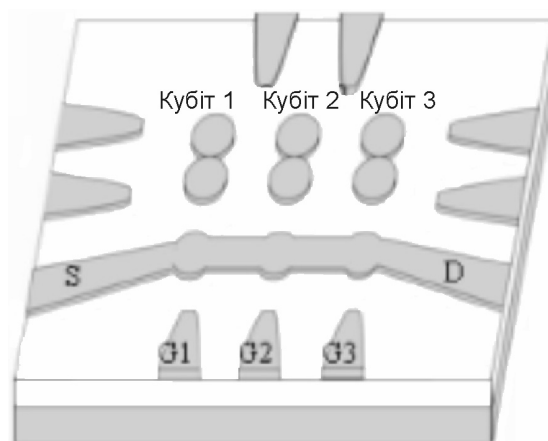


Рис. 8.33. Структура елемента пам'яті (3 кубіта)
на одноелектронних транзисторах

У такій структурі три одноелектронні транзистори з'єднані послідовно, а їх затвори керують електронним станом квантових островців і, відповідно, перемиканням їх у стани «0» або «1», оскільки кожна пара островців має два стійких стани (дві поляризації). При цьому струм перемикання становить 0,1...0,5 нА за рівнів керівних дій близько 1 В. Розглянуті квантові системи виконані за технологією «кремній на ізоляторі», проте надійних характеристик досягають за дуже низьких температур (4 К)

Вентильні властивості одноелектронних структур проявляються у різних поєднаннях матеріалів за різних значень температур [279], проте процеси одноелектронного тунелювання

мають випадкову природу і залежать від багатьох чинників, з процесами термалізації електронів включено (зокрема у зовнішньому електричному полі), що під час побудови квантових елементів пам'яті обмежує надійність їх перемикання.

Поряд з пошуками перспективних квантових структур пам'яті триває вдосконалення субмікронних структур «кремній на ізоляторі». Зокрема, розроблено напівізолюваний односторонній елемент пам'яті [280], що стабільно працює в широкому діапазоні температур.

Елемент пам'яті [281] у вигляді вертикального транзистора МДН на основі нітриду кремнію з довжиною активної області 0,1 мкм дозволяє отримувати час перемикання в області наносекунд за струму споживання близько 10 мкА.

Наведені приклади елемента пам'яті на традиційних транзисторних структурах дозволяють отримувати матриці швидкодійної пам'яті великої ємності за порівняно невеликих технологічних витрат для електронних пристроїв широкого вжитку.

Структури, що розглянуті у цьому розділі, не вичерпують всього можливого спектра компонентів, які можуть бути створені на основі використання нанотехнологій, однак представлені структури різної розмірності дозволяють виділити групу фізичних ефектів, на основі яких вже в найближчому майбутньому можливі реалізація і масове виготовлення наноконпонентів для широкого вжитку. Набувають актуальності питання розробки теорії та моделювання приладових характеристик і параметрів новітніх наноконпонентів, а також вимірювання й ідентифікації їх параметрів. Можливе створення компонентів з абсолютно новими характеристиками, а поява нових функціональних елементів приведе до перегляду технічної бази в багатьох галузях електроніки.

Рекомендована література: [239]; [240]; [241]; [242]; [243]; [244]; [245]; [246]; [247]; [248]; [249]; [250]; [251]; [252]; [253]; [254]; [255]; [256]; [257]; [258]; [259]; [260]; [261]; [262]; [263]; [264]; [265]; [266]; [267]; [268]; [269]; [270]; [271]; [272]; [273]; [274]; [275]; [276]; [277]; [278]; [279]; [280]; [281].

ДОДАТКИ

Додатки до розділу 2

Д2.1. Усереднення швидкостей розсіювання

Часи релаксації знаходять як середні для електронного колективу швидкості розсіювання для кожного виду зіткнень. Способи усереднення можуть бути різними, але більшість із них у результаті відрізняються між собою коефіцієнтом пропорційності порядку одиниць.

Основна проблема усереднення пов'язана з тим, що у правій частині кінетичного рівняння (1.12) стоїть функція розподілу, необхідна для усереднення, яку потрібно знайти заздалегідь. Оскільки зробити це зазвичай неможливо без розв'язання рівняння Больцмана, то часто роблять деяке припущення про її форму й усереднення проводять за цією гіпотетичною функцією. Найпоширенішим є середнє за функцією розподілу $N(k)$:

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \frac{\int_{V_k} \lambda_i(k) N(\vec{k}) d\vec{k}}{\int_{V_k} N(\vec{k}) d\vec{k}}, \quad (\text{Д2.1})$$

де значення λ_i обирають для кожного виду розсіювання окремо. Оскільки у знаменнику підінтегральний вираз $N(\vec{k}) d\vec{k}$ являє собою кількість електронів в елементарному об'ємі dV_k \vec{k} -простору, то, вибравши його як шар між двома ізоенергетичними поверхнями, які відповідають приросту енергії на dE , де кількість електронів дорівнює $N(E) dE$, можна перейти від усереднення за \vec{k} -простором до усереднення за енергетичною функцією розподілу:

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \frac{\int_0^\infty \lambda_i(E) N(E) dE}{\int_0^\infty N(E) dE}. \quad (\text{Д2.2})$$

Тут інтегрування проводять за всією енергетичною зоною (або відповідною підзоною) від її дна до ∞ .

Найпростішим є припущення про те, що функція $N(E)$ має вигляд розподілу Максвелла–Больцмана, але визначається не температурою кристалічної ґратки, а електронною температурою T_e . За квадратичного закону дисперсії густина станів $g(E) \sim E^{1/2}$, а $f(E) \sim \exp(-E/k_B T_e)$. Використовуючи позначення $E/k_B T_e \equiv \varepsilon$, отримаємо після скорочення

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \frac{\int_0^{\infty} \lambda_i(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon} d\varepsilon}{\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon} d\varepsilon} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \lambda_i(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (\text{Д2.3})$$

Тут використано значення табличного інтеграла, що стоїть у знаменнику (Д2.2),

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Інший спосіб обчислення часу релаксації імпульсу полягає в усередненні λ_i з ваговим коефіцієнтом \vec{k} відповідно до виразу (1.59):

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \frac{\int_{V_k} \lambda_i(\vec{k}) \vec{k} N(\vec{k}) d\vec{k}}{\int_{V_k} \vec{k} N(\vec{k}) d\vec{k}}. \quad (\text{Д2.4})$$

Перейшовши від усереднення за \vec{k} -простором до усереднення за енергетичними станами зони подібно до попереднього випадку, за квадратичного закону дисперсії отримаємо:

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \frac{\int_0^{\infty} \lambda_i(E) \sqrt{E} N(E) dE}{\int_0^{\infty} \sqrt{E} N(E) dE}. \quad (\text{Д2.5})$$

Якщо вважати, що електронний газ залишається невідродженим, а його функція розподілу – максвеллівською, та враховуючи, що $\int_0^\infty \varepsilon e^{-\varepsilon} d\varepsilon = 1$, то з такими ж позначеннями, як і для (Д2.3), отримаємо

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \int_0^\infty \lambda_i(\varepsilon) \varepsilon e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (\text{Д2.6})$$

Домішкове розсіювання. Для розсіювання на іонізованих домішках у моделі Конуелл–Вайскопфа подамо (2.18) у розгорнутому вигляді, використовуючи наведені там позначення:

$$\lambda_d = 2N_d \sqrt{\frac{2}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \right)^2 E^{-3/2} \ln \left(1 + \frac{4\pi\varepsilon\varepsilon_0}{e^2} \frac{E}{N_d^{1/3}} \right). \quad (\text{Д2.7})$$

Аналітичне інтегрування цього виразу ускладнюється наявністю останнього співмножника, тому враховуючи, що логарифмічна залежність слабка порівняно зі степеневою, без особливих втрат точності можна вважати $E = 3k_B T_e / 2$. Нормуючи енергію ($E/k_B T_e \equiv \varepsilon$), матимемо:

$$\lambda_d = N_d \sqrt{\frac{8}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \right)^2 (k_B T_e)^{-3/2} \ln \left(1 + \frac{6\pi\varepsilon\varepsilon_0}{e^2} \frac{k_B T_e}{N_d^{1/3}} \right) \varepsilon^{-3/2}. \quad (\text{Д2.8})$$

Використовуючи другий спосіб усереднення (Д2.6) та беручи до уваги, що $\int_0^\infty \varepsilon^{-1/2} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = \sqrt{\pi}$, отримаємо для часу релаксації імпульсу при розсіюванні на іонізованих домішках

$$\frac{1}{\tau_{pd}} = \sqrt{\frac{8\pi}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \right)^2 \ln \left(1 + \frac{6\pi\varepsilon\varepsilon_0}{e^2} \frac{k_B T_e}{N_d^{1/3}} \right) N_d (k_B T_e)^{-3/2}. \quad (\text{Д2.9})$$

Зазначимо, що в літературних джерелах описано й інші способи усереднення, що дають результат, який відрізняється коефіцієнтом пропорційності порядку одиниць. Крім того, якщо об'єм $N_d^{-1/3}$, який займає в середньому один домішковий атом, вважати сферичним, і взяти за максимальну прицільну відстань його радіус, то результат (Д2.9) треба зменшити в $6/\pi$ разів.

Це свідчить про те, що в разі порівняння з експериментом у (Д2.9) можна ввести деякий підгінний параметр.

Акустичне розсіювання. Вираз (2.12) для швидкості розсіювання на акустичних фононах з використанням змінної ε має вигляд

$$\lambda_a = \frac{(2m^*)^{3/2} D_a^2 k_B T}{2\pi v_{3B}^2 \hbar^4} \sqrt{k_B T_e} \sqrt{\varepsilon} \equiv A_a \sqrt{\varepsilon}. \quad (\text{Д2.10})$$

З обчислення часу релаксації імпульсу за (Д2.6) маємо інтеграл

$$\frac{1}{\tau_{pa}} = A_a \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} A_a = \frac{3(2m^*)^{3/2} D_a^2 k_B T}{8\sqrt{\pi} v_{3B}^2 \hbar^4} \sqrt{k_B T_e}. \quad (\text{Д2.11})$$

Іноді використовують вираз, який випливає з (Д2.10) після простої заміни $E = 3k_B T_e/2$:

$$\frac{1}{\tau_{pa}} = \sqrt{\frac{3}{2}} A_a = \frac{(m^*)^{3/2} D_a^2 k_B T}{\pi v_{3B}^2 \hbar^4} \sqrt{k_B T_e}. \quad (\text{Д2.12})$$

Оптичне розсіювання. Для зручності запису подальших результатів подамо множник $(N_\phi + 1/2 \pm 1/2)$, який враховує кількість оптичних фононів, що беруть участь у розсіюванні, з урахуванням формули Планка (2.3), у такій формі:

$$N_\phi + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} = \frac{e^{\pm t}}{2 \operatorname{sh} t}. \quad (\text{Д2.13})$$

Тут уведено позначення $t = \hbar\omega_o/2k_B T$. Використовуючи також позначення $t_e = \hbar\omega_o/2k_B T_e$ та нормуючи енергію ($E/k_B T_e \equiv \varepsilon$), запишемо вираз (2.13) для швидкості розсіювання на оптичному деформаційному потенціалі:

$$\lambda_o^\pm = \frac{(m^*)^{3/2} D_o^2}{\sqrt{2}\pi\hbar^3\omega_o} \frac{e^{\pm t}}{2 \operatorname{sh} t} \sqrt{k_B T_e} \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e} \equiv A_o^\pm \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e}. \quad (\text{Д2.14})$$

Визначити час релаксації імпульсу в аналітичному вигляді тут можна з використанням усереднення за (Д2.3):

$$\frac{1}{\tau_{po}^\pm} = \frac{2A_o^\pm}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (\text{Д2.15})$$

Для поглинання фононів (верхній знак) $\varepsilon + 2t_e > 0$, оператор Re втрачає сенс. У результаті отримуємо безпосередньо табличний інтеграл²⁶

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon(\varepsilon + 2t_e)} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = t_e \exp(t_e) K_1(t_e), \quad (\text{Д2.16})$$

де $K_1(t_e)$ – модифікована функція Бесселя від уявного аргумента другого роду першого порядку.

Для збудження фононів (нижній знак) оператор Re можна випустити, якщо нижньою межею інтегрування вибрати значення $\varepsilon = 2t_e$, вище якого підкореневий вираз у (Д2.15) стає додатним. Звести цей інтеграл до вигляду (Д2.16) можна заміною змінної $\varepsilon = \xi + 2t_e$:

$$\int_{2t_e}^{\infty} \sqrt{\varepsilon(\varepsilon - 2t_e)} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = e^{-2t_e} \int_0^{\infty} \sqrt{\xi(\xi + 2t_e)} e^{-\xi} d\xi = t_e e^{-t_e} K_1(t_e). \quad (\text{Д2.17})$$

З урахуванням двох останніх інтегралів вираз (Д2.15) у загальному вигляді можна записати як

$$\frac{1}{\tau_{po}^{\pm}} = \frac{2A_0^{\pm}}{\sqrt{\pi}} t_e e^{\pm t_e} K_1(t_e) = \frac{(m^*)^{3/2} D_0^2}{2\sqrt{2}\pi^{3/2}\rho\hbar^2} \frac{e^{\pm(t-t_e)}}{\sqrt{k_B T_e} \text{sh } t} K_1(t_e). \quad (\text{Д2.18})$$

Після підсумовування обернених часів у разі поглинання та збудження отримуємо повний обернений час релаксації імпульсу для неполярного оптичного розсіювання:

$$\frac{1}{\tau_{po}} = \frac{(m^*)^{3/2} D_0^2}{\sqrt{2}\pi^{3/2}\rho\hbar^2} \frac{\text{ch}(t - t_e)}{\sqrt{k_B T_e} \text{sh } t} K_1(t_e). \quad (\text{Д2.19})$$

У разі **полярного оптичного розсіювання** подамо вираз (2.14) з використанням тих самих позначень, що й для неполярного, увівши *полярну оптичну константу*

$$\alpha = \frac{e^2 \sqrt{m^*}}{4\sqrt{2} \pi \varepsilon_0 \hbar (\hbar\omega_0)^{1/2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_{\text{ст}}} \right)$$

²⁶ Г. Н. Ватсон. Теория бесселевых функций. – М. : ИЛ, 1949.

у такому вигляді:

$$\lambda_{\text{по}}^{\pm} = \frac{\alpha\omega_0}{\sqrt{2}} \frac{e^{\mp t}}{\text{sh } t} \sqrt{\frac{t_e}{\varepsilon}} \ln \left| \frac{\sqrt{\varepsilon} + \text{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e}}{\sqrt{\varepsilon} - \text{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e}} \right| \equiv \frac{A_{\text{по}}^{\pm}}{\sqrt{\varepsilon}} \ln F^{\pm}(\varepsilon). \quad (\text{Д2.20})$$

Викорстання усереднення (Д2.3) дає вираз для обернених часів релаксації при поглинанні та збудженні фонона:

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^{\pm}} = \frac{2A_{\text{по}}^{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \ln F^{\pm}(\varepsilon) e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (\text{Д2.21})$$

Обчислювати ці інтеграли краще окремо. Для поглинання фонона підкореневі вирази є додатними й оператор Re втрачає сенс, тому

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^{+}} = \frac{2A_{\text{по}}^{+}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \ln \frac{\sqrt{\varepsilon + 2t_e} + \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon + 2t_e} - \sqrt{\varepsilon}} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (\text{Д2.22})$$

Наступне інтегрування зручно проводити по частинах. Позначивши $u = \ln F^{+}(\varepsilon)$, $dv = e^{-\varepsilon} d\varepsilon$ та врахувавши, що $e^{-\varepsilon} \ln F^{+}|_0^{\infty} = 0$, а $d(\ln F^{+}) = d\varepsilon / 2\sqrt{\varepsilon(\varepsilon + 2t_e)}$, отримаємо інтеграл

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^{+}} = \frac{A_{\text{по}}^{+}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\varepsilon} d\varepsilon}{2\sqrt{\varepsilon(\varepsilon + 2t_e)}} = \frac{A_{\text{по}}^{+}}{\sqrt{\pi}} e^{+t_e} K_0(t_e), \quad (\text{Д2.23})$$

де $K_0(t_e)$ – модифікована функція Бесселя від уявного аргумента другого роду нульового порядку.

У разі збудження фонона (нижній знак) вираз (Д2.21) має сенс тільки за $\varepsilon > 2t_e$, тому

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^{-}} = \frac{2A_{\text{по}}^{-}}{\sqrt{\pi}} \int_{2t_e}^{\infty} \ln \frac{\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon - 2t_e}}{\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon - 2t_e}} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (\text{Д2.24})$$

Заміною змінної $\varepsilon = \xi + 2t_e$ цьому інтегралу можна надати такого вигляду (Д2.22):

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^{-}} = \frac{2A_{\text{по}}^{-}}{\sqrt{\pi}} e^{-2t_e} \int_0^{\infty} \ln \frac{\sqrt{\xi + 2t_e} + \sqrt{\xi}}{\sqrt{\xi + 2t_e} - \sqrt{\xi}} e^{-\xi} d\xi = \frac{A_{\text{по}}^{-}}{\sqrt{\pi}} e^{-t_e} K_0(t_e). \quad (\text{Д2.25})$$

Вирази (Д2.23) і (Д2.25) можна об'єднати:

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^{\pm}} = \frac{\alpha\omega_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{\mp(t-t_e)}}{\text{sh } t} \sqrt{t_e} K_0(t_e). \quad (\text{Д2.26})$$

Повний час релаксації імпульсу для полярного оптичного розсіювання знаходять через суму останніх виразів для поглинання і збудження:

$$\frac{1}{\tau_{p\text{ по}}} = \frac{1}{\tau_{p\text{ по}}^+} + \frac{1}{\tau_{p\text{ по}}^-} = \frac{\alpha\omega_0\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \frac{\text{ch}(t-t_e)}{\text{sh } t} \sqrt{t_e} K_0(t_e). \quad (\text{Д2.27})$$

Міждолинне розсіювання. Вираз (2.16) для швидкості міждолинного розсіювання дещо подібний до виразу (2.13) для неполярного оптичного розсіювання і для нормованої енергії ($E/k_B T_e \equiv \varepsilon$) з урахуванням (Д2.13) для переходів з i -долини в j -ту його можна подати так:

$$\lambda_{ij}^{\pm} = \frac{Z_j(m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{\sqrt{2\pi}\hbar^3 \omega_{ij}} \frac{e^{\mp t}}{\text{sh } t} \sqrt{kT_e} \text{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e - \delta} \equiv A_{ij}^{\pm} \text{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e - \delta}. \quad (\text{Д2.28})$$

Слід пам'ятати, що в параметри t_e й t тут потрібно підставляти енергію міждолинних фононів $\hbar\omega_{ij}$, а величина $\delta \equiv \Delta_{ij}/k_B T_e$ — це нормована міждолинна відстань Δ_{ij} , яку відраховують від дна j -ї долини до дна i -ї з урахуванням знака (для скорочення запису біля δ індекси випущено).

Як і для оптичного розсіювання час релаксації імпульсу визначимо в аналітичному вигляді, використовуючи усереднення за (Д2.3):

$$\frac{1}{\tau_{pij}^{\pm}} = \frac{2A_{ij}^{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \text{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e - \delta} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (\text{Д2.29})$$

Подальше інтегрування залежить від співвідношення між енергією фононів та міждолинною відстанню. На практиці важливішою є ситуація, коли $\hbar\omega_{ij} < \Delta_{ij}$ або $\delta > 2t_e$, бо саме в цьому разі виявляються специфічні особливості багатодолинних напівпровідників.

Для переходів електронів з нижньої долини у верхню величина δ , а отже й $\delta \pm 2t_e$, більша від нуля, і розсіювання можливе тільки якщо енергія електрона перевищує величину $\Delta_{ij} \pm \hbar\omega_{ij}$. При цьому оператор Re можна випустити, якщо нижньою межею

інтегрування буде величина $\delta \pm 2t_e$. У цьому разі інтеграл (Д2.29) обчислюють як і для оптичного розсіювання:

$$\int_{\delta \mp 2t_e}^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon - (\delta \mp 2t_e)} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = \left(\frac{\delta}{2} \mp t_e \right) e^{-(\delta/2 \mp t_e)} K_1 \left(\frac{\delta}{2} \mp t_e \right). \quad (\text{Д2.30})$$

Переходи в нижню долину ($\delta < 0$) можливі для довільної енергії, оскільки $\pm 2t_e - \delta > 0$, то оператор Re втрачає сенс і

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon - \delta \pm 2t_e} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = \left(\pm t_e - \frac{\delta}{2} \right) e^{-(\pm t_e - \delta/2)} K_1 \left(\pm t_e - \frac{\delta}{2} \right). \quad (\text{Д2.31})$$

Інтеграли (Д2.30) та (Д2.31) можна подати як один $-|\delta / 2 \mp t_e| \exp(-\delta / 2 \pm t_e) K_1 |\delta / 2 \mp t_e|$, а час релаксації імпульсу для розсіювання між нееквівалентними долинами під час поглинання та збудження фононів обчислити за формулою

$$\frac{1}{\tau_{pij}^{\pm}} = \frac{Z_j (m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{\sqrt{2} \pi^{3/2} \rho \hbar^3 \omega_{ij}} \frac{e^{-\delta/2}}{\text{sh } t} \sqrt{k_B T_e} e^{\mp(t-t_e)} \left| \frac{\delta}{2} \mp t_e \right| K_1 \left| \frac{\delta}{2} \mp t_e \right|. \quad (\text{Д2.32})$$

Вираз для сумарного оберненого часу релаксації не вдається отримати компактним у загальному вигляді, але для найважливішого для практики випадку за суттєвого перевищення $\Delta_{ij} \gg \hbar \omega_{ij}$ можна знехтувати t_e порівняно з $\delta/2$ у повільних функціях під знаком модуля, тоді

$$\frac{1}{\tau_{pij}} = \frac{Z_j (m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{2 \pi^{3/2} \rho \hbar^2 (\hbar \omega_{ij})^{1/2}} \frac{\text{ch}(t - t_e) |\delta|}{\text{sh } t} \frac{1}{t_e^{1/2}} e^{-\delta/2} K_1 \left| \frac{\delta}{2} \right|. \quad (\text{Д2.33})$$

Якщо міждолинна відстань незначна й $\Delta_{ij} < \hbar \omega_{ij}$, то для часу релаксації імпульсу можна використовувати формулу (Д2.19) для неполярного оптичного розсіювання, де до значення енергії фонона треба внести поправку $\pm \Delta_{ij}$ або (Д2.32), а під знаком модуля підставляти половину загальної зміни енергії, яка відбувається під час розсіювання того чи іншого виду.

В окремому випадку за $\Delta_{ij} = 0$ маємо розсіювання між еквівалентними долинами, а інтеграл (Д2.29) фактично зводиться

до (Д2.15) і відповідний час релаксації можна обчислити, як і для розсіювання на оптичному деформаційному потенціалі

$$\frac{1}{\tau_{pii}^{\pm}} = \frac{(Z_i - 1)(m_i^*)^{3/2} D_{ii}^2}{\sqrt{2}\pi^{3/2} \rho \hbar^3 \omega_{ii}} \frac{e^{\mp(t-t_e)}}{\text{sh } t} \sqrt{k_B T_e} K_1(t_e), \quad (\text{Д2.34})$$

а для повного часу

$$\frac{1}{\tau_{pii}} = \frac{(Z_i - 1)(m_i^*)^{3/2} D_{ii}^2}{\pi^{3/2} \rho \hbar^2 (\hbar \omega_{ii})^{1/2}} \frac{\text{ch}(t - t_e)}{\text{sh } t} \sqrt{t_e} K_1(t_e), \quad (\text{Д2.35})$$

де $(Z_i - 1)$ – кількість «інших» еквівалентних долин, у які відбувається перехід електрона; m_i^* – ефективна маса густини станів у одній долині.

Для спрощення отриманих розрахункових співвідношень можна використовувати наближені формули для функцій Бесселя. За малих значень аргумента ($x \ll 1$) можливі апроксимації $K_0(x) \approx \ln(2/x)$, $K_1(x) \approx 1/x$, а за великих аргументів ($x \gg 1$) $K_0(x) \approx K_1(x) \approx \sqrt{\pi/2x} \exp(-x)$. До того ж корисним може бути диференціальне співвідношення $K_n'(x) = -K_{n-1}(x) - nK_n(x)/x$.

Поблизу значень точки x_0 біля одиниці можливе лінійне подання функції $K_1(x)$ з розкладанням її в ряд за степенями, оберненими до аргумента:

$$K_1(x) \approx -x_0 K_0(x_0) + [x_0 K_0(x_0) + K_1(x_0)] \frac{x_0}{x}. \quad (\text{Д2.36})$$

Тут використано попереднє співвідношення для функції першого порядку: $K_1'(x) = -K_0(x) - K_1(x)/x$.

Таке подання дозволяє суттєво спростити вигляд функції (Д2.33) для міждолинного розсіювання. Якщо за точку розкладу взяти електронну температуру $T_e = \Delta_{ij}/k_B$, за якої $\delta = 1$, то

$$K_1\left(\frac{\delta}{2}\right) \approx -\frac{K_0(0,5)}{2} + \left[\frac{K_0(0,5)}{2} + K_1(0,5)\right] \frac{k_B T_e}{\Delta_{ij}} = -0,4622 + 2,1186 \frac{k_B T_e}{\Delta_{ij}}.$$

За цих температур $t_e \ll t$ й $\text{ch}(t - t_e) \approx \text{cht}$, а інші співмножники, крім $K_1(\delta/2)$, являють собою досить слабку функцію

електронної температури, що має похилий максимум за $\delta = 1$. Замінивши цей добуток його максимальним значенням

$$[t_e^{-1/2} \cdot \delta \cdot \exp(\delta/2)]_{\max} = \sqrt{\frac{2\Delta_{ij}}{e \hbar \omega_{ij}}},$$

отримаємо, що обернений час міждолинної релаксації з хорошим наближенням можна вважати лінійною функцією температури:

$$\frac{1}{\tau_{pij}} = \frac{Z_j (m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{2\pi^{3/2} \rho \hbar^3 \omega_{ij}} \sqrt{\frac{2\Delta_{ij}}{e}} \cdot \operatorname{cth} t \left(-0,4622 + 2,1186 \frac{k_B T_e}{\Delta_{ij}} \right). \quad (\text{Д2.37})$$

Слід мати на увазі, що ця апроксимація придатна для переходів до верхніх j -долин ($\Delta_{ij} > 0$) в інтервалі температур 2000...6000 К, де переважає міждолинне розсіювання. Для розрахунку часу релаксації для переходів у нижні i -долини ($\Delta_{ji} < 0$) іноді зручніше використовувати співвідношення (1.70), враховуючи, що $\tau_{nij} \approx \tau_{pij}$:

$$\frac{1}{\tau_{pji}} = \frac{n_i}{n_j} \frac{1}{\tau_{pij}} = \left(\frac{m_i^*}{m_j^*} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right) \frac{1}{\tau_{pij}}. \quad (\text{Д2.38})$$

Для розсіювання між еквівалентними долинами аргументом функції Бесселя є відношення $t_e = \hbar \omega_{ij} / 2k_B T_e$, яке в області великих електронних температур суттєво менше за одиницю, і можлива апроксимація $K_1(x) \approx 1/x$, яка дозволяє подати вираз (Д2.35) у більш простому вигляді:

$$\frac{1}{\tau_{pii}} = \frac{(Z_i - 1)(m_i^*)^{3/2} D_{ii}^2}{\pi^{3/2} \rho \hbar^3 \omega_{ii}} \cdot \operatorname{cth} t \cdot \sqrt{2k_B T_e}. \quad (\text{Д2.39})$$

Для полярного оптичного розсіювання за великих електронних температур ($\hbar \omega_0 / 2k_B T_e \ll 1$) можна скористатися апроксимацією $K_0(x) \approx \ln(2/x) - 0,5772$.

Додатки до розділу 3

Д3.1. Розігрівання електронів у багатодолинних напівпровідниках

Для оцінювання внеску електронів різних долин у середню електронну температуру запишемо співвідношення (3.7) для двох долин i , виключивши з них напруженість поля, отримаємо зв'язок між електронними температурами в різних долинах. Проте складна залежність $\mu(T_e)$ й $\gamma(T_e)$, особливо за наявності декількох видів розсіяння, не дає підстав сподіватися на прийнятний для аналітичного використання результат.

Основою припущень для спрощення може бути те, що питання про температуру у верхній долині виникає тільки за наявності міждолинних переходів, зазвичай при цьому в нижній долині вже спостерігається режим насичення ($v = v_n = \text{const}$). З формули (3.4) випливає, що енергія дрейфу пропорційна першому степеню напруженості поля:

$$E_d = \frac{e\tau_p v_n \mathcal{E}}{2}, \quad (\text{Д3.1})$$

а вираз (3.7) можна подати у вигляді

$$\frac{T_e}{T} - 1 = \frac{e\tau_p v_n \mathcal{E}}{2E_0} (\gamma - 1). \quad (\text{Д3.2})$$

Для дрейфової швидкості можна взяти апроксимацію (3.18):

$$v = v_T \sqrt{\frac{T_e / T - 1}{\gamma - 1}}, \quad (\text{Д3.3})$$

де

$$\gamma = \frac{2\tau_E}{\tau_p} = \frac{3}{2} \frac{t - t_e}{t t_e \text{th}(t - t_e)} \quad (\text{Д3.4})$$

ϵ коефіцієнтом непружності зіткнень (див. вираз (2.36)), а $t \equiv \hbar\omega_\phi / 2k_B T$; $t_e \equiv \hbar\omega_\phi / 2k_B T_e$.

За сильного розігрівання в нижній долині ($T_e/T \gg 1$ й $t \gg t_e$) можна вважати, що коефіцієнт непружності для фононних

механізмів зіткнень пропорційний електронній температурі (у разі оптичного й міждолинного розсіювання),

$$\gamma = \frac{3}{2t} \frac{T_e}{T} \equiv \beta \frac{T_e}{T}, \quad (\text{ДЗ.5})$$

і з (ДЗ.3) випливає:

$$v_H = \frac{v_T}{\sqrt{\beta}}; \quad (\text{ДЗ.6})$$

$$\mathcal{E} = \frac{v_T}{\mu\sqrt{\beta}}. \quad (\text{ДЗ.7})$$

Цікаво, що температура залежить від поля неявно, через рухливість $\mu(T_e)$, тобто через час релаксації імпульсу.

Зводячи вираз (ДЗ.7) у квадрат і присвоюючи величинам для нижньої долини індекс «1», отримаємо:

$$\mathcal{E}^2 = \frac{v_{T1}^2}{\mu_1^2 \beta_1} = \frac{2E_0}{m_{c1}^* \mu_1^2 \beta_1}. \quad (\text{ДЗ.8})$$

Для «теплих» електронів верхньої долини $t \approx t_e$ коефіцієнт непружності (ДЗ.4) також можна подати пропорційним електронній температурі, але з дещо іншим коефіцієнтом пропорційності:

$$\gamma = \frac{3}{2t^2} \frac{T_e}{T} \equiv \beta_2 \frac{T_e}{T}. \quad (\text{ДЗ.9})$$

Підставляючи вираз (ДЗ.8) і (ДЗ.9) у рівняння (3.7) для верхньої долини (індекс «2»), отримаємо:

$$\frac{T_{e2}}{T} - 1 = \frac{m_{c2}^* \mu_2^2 \mathcal{E}^2}{3k_B T} \left(\beta_2 \frac{T_{e2}}{T} - 1 \right) = \frac{m_{c1}^*}{m_{c2}^*} \left(\frac{\tau_{p2}}{\tau_{p1}} \right)^2 \frac{1}{\beta_1} \left(\beta_2 \frac{T_{e2}}{T} - 1 \right). \quad (\text{ДЗ.10})$$

З урахуванням залежностей параметрів нижньої долини від T_{e1} цей вираз може служити рівнянням для знаходження T_{e2} . Час релаксації τ_{p2} можна в першому наближенні вважати незалежним від T_{e2} , визначаючи його, наприклад, для температури T . Коефіцієнт β_1 можна обчислити за (ДЗ.5) з урахуванням енергії міждолинних фононів, а β_2 за (ДЗ.9) для оптичних фононів.

Результати розрахунків, наведені на рис. ДЗ.1, показують,

що міра розігрівання електронів у верхній долині істотно менша, ніж у нижній. Це дає змогу за потреби знаходити часи релаксації, беручи електронну температуру для верхньої долини рівну температурі ґратки.

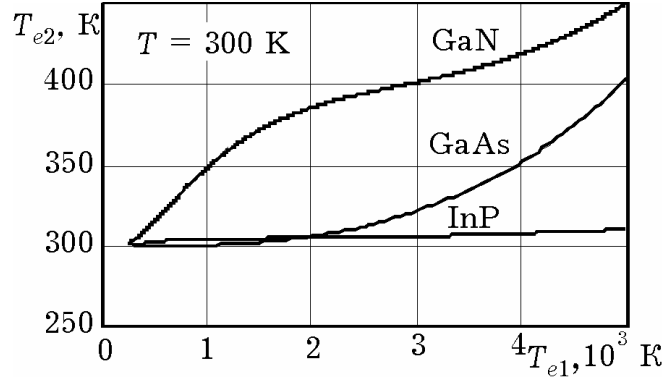


Рис. Д3.1. Залежність електронної температури у верхній долині від температури електронів нижньої долини для деяких напівпровідників

Д3.2. Високочастотна провідність

Обмежимося режимом малого сигналу, за якого всі змінні величини $a(t)$ подають у вигляді суми постійної складової a_0 й малої гармонічно мінливої в часі з амплітудою a_{\sim} , тобто $a(t) = a_0 + a_{\sim} e^{i\omega t}$. Знехтувавши членами другого порядку малості й з огляду на те, що $\partial/\partial t = i\omega$, використовувані рівняння поділимо на незалежні від часу для постійних складових і лінійні рівняння для амплітуд змінних.

Використання такої процедури для густини струму $j = env$ дозволяє отримати для обчислення його високочастотної складової таке співвідношення:

$$j_{\sim} = en_0 v_{\sim} + ev_0 n_{\sim}. \quad (\text{Д3.11})$$

Величину v_{\sim} можна знайти з рівняння балансу імпульсу (1.57), яке для змінних складових матиме вигляд

$$i\omega v_{\sim} = \left(\frac{e}{m^*} \right) \mathcal{E}_{\sim} - (\tau_{p0}^{-1}) v_{\sim} - v_0 (\tau_p^{-1})_{\sim},$$

звідки

$$v_{\sim} = \left(\frac{e}{m^*} \right) \tau_{p\omega} \mathcal{E}_{\sim} - v_0 \tau_{p\omega} (\tau_p^{-1})_{\sim}, \quad (\text{Д3.12})$$

де

$$\tau_{p\omega} = \frac{\tau_{p0}}{1 + i\omega\tau_{p0}}. \quad (\text{Д3.13})$$

Величину $(\tau_p^{-1})_{\sim}$ можна знайти з функції $\tau_p^{-1}(T_e(\mathcal{E}))$ з урахуванням її неявної залежності від напруженості поля за малого сигналу таким чином:

$$\tau_{p\sim}^{-1} = \frac{d(\tau_p^{-1})}{dT_e} T_{e\sim}. \quad (\text{Д3.14})$$

Тоді внесок першого доданка з (Д3.11) у динамічну провідність матиме вигляд

$$\sigma_{\omega}^{(1)} = \frac{e^2 n_0 \tau_{p\omega}}{m^*} \left[1 - \frac{m^* v_0}{e} \frac{d(\tau_p^{-1})}{dT_e} T_{e\sim} \right]. \quad (\text{Д3.15})$$

Похідну тут, як і раніше, для сильних полів замінюють відношенням τ_{p0}^{-1}/T_e . Високочастотна складова температури $T_{e\sim}$ визначається інерційністю процесів релаксації енергії, її можна знайти з нестационарного рівняння балансу енергії (1.60). Якщо вважати, що із насиченням швидкості хаотичний (тепловий) рух переважає над дрейфовим ($\gamma = E_T/E_d \gg 1$) і, відповідно, $\tau_E \approx \text{const}(T_e)$, то малосигнальна частина рівняння балансу енергії набуде вигляду

$$i\omega E_{T\sim} = ev_H \mathcal{E}_{\sim} - \frac{E_{T\sim}}{\tau_{E0}}. \quad (\text{Д3.16})$$

Звідси, увівши поняття *комплексного високочастотного часу релаксації енергії*

$$\tau_{E\omega} = \frac{\tau_{E0}}{1 + i\omega\tau_{E0}}, \quad (\text{Д3.17})$$

отримаємо для малосигнальної частини електронної температури:

$$T_{e\sim} = \left(\frac{2ev_H \tau_{E\omega}}{3k_B} \right) \mathcal{E}_{\sim}. \quad (\text{Д3.18})$$

У підсумку (Д3.15) можна подати у такому вигляді:

$$\sigma_{\omega}^{(1)} = \frac{\sigma_0}{1 + i\omega\tau_{p0}} \left[1 - \frac{v_0}{v_H} \frac{1}{1 + i\omega\tau_{E0}} \right]. \quad (\text{Д3.19})$$

Значення змінної складової концентрації n_{\sim} у (Д3.11) знаходять з рівнянь балансу для концентрацій електронів у долинах (1.67) та (1.68). Записуючи їх для відносних величин $b_i = n_i/n$ (у дводолинному наближенні) й беручи до уваги, що $b_{i\sim} = -b_{j\sim} \equiv b_{\sim}$, отримаємо для її малосигнальної частини

$$i\omega b_{\sim} = -b_{\sim} \left(\frac{1}{\tau_{ij0}} + \frac{1}{\tau_{ji0}} \right) - b_{i0} \left(\tau_{ij}^{-1} \right)_{\sim} + b_{j0} \left(\tau_{ji}^{-1} \right)_{\sim}. \quad (\text{Д3.20})$$

Якщо ввести поняття сумарного для всіх долин часу міждолинної релаксації

$$\tau_{\text{м}} = \left(\frac{1}{\tau_{ij0}} + \frac{1}{\tau_{ji0}} \right)^{-1}, \quad (\text{Д3.21})$$

то з огляду на (Д3.20) змінну складову заселеності можна подати так:

$$b_{\sim} = \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_{\text{м}}} \left[\tau_{ij0} \left(\tau_{ij}^{-1} \right)_{\sim} - \tau_{ji0} \left(\tau_{ji}^{-1} \right)_{\sim} \right], \quad (\text{Д3.22})$$

де використано співвідношення $b_{i0} = \tau_{\text{м}}/\tau_{ji0}$ й $b_{j0} = \tau_{\text{м}}/\tau_{ij0}$, які слідує безпосередньо з визначення заселеностей і правих частин рівнянь балансу концентрацій для їх постійних складових. Крім того, співвідношення $b_{j0}/b_{i0} = \tau_{ij0}/\tau_{ji0}$ зручно використовувати для подання другого співмножника в (Д3.22) у більш простій формі:

$$b_{\sim} = \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_{\text{м}}} \frac{(\tau_{ji} / \tau_{ij})_{\sim}}{\tau_{ji0} / \tau_{ij0}}. \quad (\text{Д3.23})$$

Якщо для обчислення відношення часу міждолинної релаксації скористатися співвідношенням (1.70), то отримаємо

$$b_{\sim} = - \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_{\text{м}}} \frac{\Delta_{ji}}{k_{\text{Б}}T_e^2} T_{e\sim}. \quad (\text{Д3.24})$$

Використовуючи (Д3.18) для $T_{e\sim}$, отримаємо з (Д3.11) додатково до (Д3.15) другий доданок для високочастотної електропровідності:

$$\sigma_{\omega}^{(2)} = - \frac{e^2 n_0 \tau_{p0}}{m^*} \frac{v_0}{v_{\text{н}}} \frac{\tau_{E\omega}}{\tau_{E0}} \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_{\text{м}}} \frac{\Delta_{ji}}{k_{\text{Б}}T_e}. \quad (\text{Д3.25})$$

Якщо, як і раніше, вважати, що значення провідності визначається переважно електронами Γ -долини, то сума (Д3.15) і (Д3.25) за $\omega \rightarrow 0$ збігається з формулою (3.37), що описує низькочастотну диференціальну провідність. Значення високочастотної електропровідності, нормоване на її статичне значення, можна розрахувати за співвідношенням

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma} = \frac{\tau_{p\omega}}{\tau_{p0}} - \frac{\nu_{0\Gamma}}{\nu_{n\Gamma}} \frac{\tau_{E\omega}}{\tau_{E0}} \left(\frac{\tau_{p\omega}}{\tau_{p0}} + \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_m} \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right). \quad (\text{Д3.26})$$

Додатки до розділу 4

Д4.1. Рівноважний стан контакту «канал-підкладка»

На межі епітаксiального шару з підкладкою за рахунок контакту двох напівпровідників з різною концентрацією донорної домішки через дифузiю носіїв виникає контактне поле, що викликає режими збагачення (у підкладці) і збіднення (у каналі). Рівняння Пуассона у площині, поперечній до каналу, запишемо у вигляді

$$\frac{d^2 V}{dy^2} = \frac{e}{\epsilon \epsilon_0} [n(y) - N_{\text{д.п}}],$$

де в рівноважному стані $n(y) = n_0 \exp[eV(y) / k_B T]$.

Вибираючи початок відліку потенціалу в глибині епітаксiального шару (рис. Д4.1), маємо $n_0 = N_{\text{д}}$. У глибині підкладки, де $n(y) = N_{\text{д.п}}$, потенціал становитиме $-V_{\text{к0}}$. Контактна різниця потенціалів визначається співвідношенням $V_{\text{к0}} = (k_B T / e) \ln(N_{\text{д}} / N_{\text{д.п}})$.

З урахуванням прийнятих положень і використанням позначень: $l_{\text{е.п}} \equiv \sqrt{2\epsilon \epsilon_0 k_B T / e^2 N_{\text{д.п}}}$, $Y \equiv eV / k_B T$, $z \equiv (y-a) / l_{\text{е.п}}$, рівняння Пуассона набуде вигляду

$$\frac{d^2 Y}{dz^2} = 2[\exp(Y + Y_{\text{к}}) - 1]. \quad (\text{Д4.1})$$

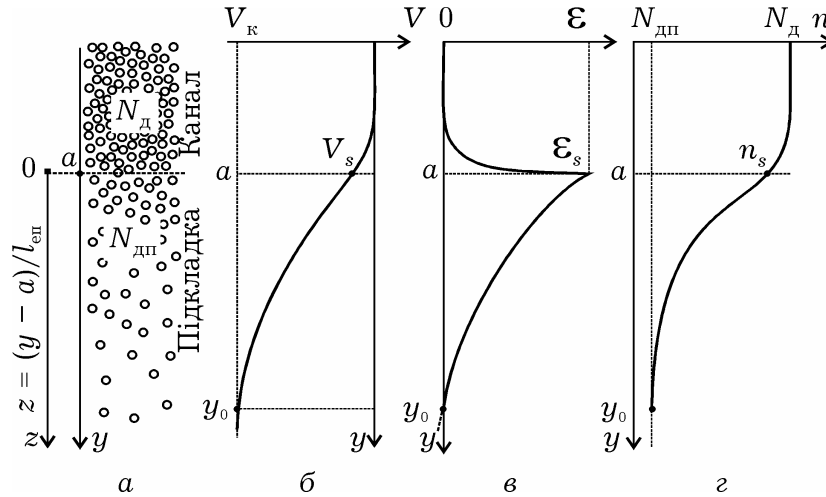


Рис. Д4.1. Розподіли потенціалу, напруженості електричного поля та електронної концентрації поблизу межі донорних напівпровідників з різною концентрацією домішки

Помножуючи обидві частини рівняння (Д4.1) на dY/dz :

$$\frac{dY}{dz} \frac{d}{dz} \left(\frac{dY}{dz} \right) = 2[\exp(Y + Y_k) - 1] \frac{dY}{dz},$$

отримаємо:

$$d \left(\frac{dY}{dz} \right)^2 = 2[\exp(Y + Y_k) - 1] dY.$$

Інтегруючи це рівняння, матимемо:

$$\frac{dY}{dz} = \pm \sqrt{2[\exp(Y + Y_k) - (Y + Y_k) + C]}, \quad (\text{Д4.2})$$

де C – константа інтегрування, визначувана з умови $dY/dz \approx 0$ у глибині підкладки.

За умови $\exp(Y + Y_k) \gg (Y + Y_k)$, що досить добре виконується за $N_d \gg N_{dp}$ та $dY/dz \approx 0$ у глибині підкладки, з (Д4.2) можна отримати

$$\frac{dY}{dz} \approx -\sqrt{2} \exp\left(\frac{Y + Y_k}{2}\right). \quad (\text{Д4.3})$$

Вводячи нормований потенціал Y_s на межі «канал-підкладка» й інтегруючи (Д4.3) від Y_s до Y , отримаємо наближений розв'язок для потенціалу:

$$Y \approx Y_s - 2 \ln \left\{ 1 + \frac{z}{\sqrt{2}} \exp\left[\frac{Y + Y_k}{2}\right] \right\}. \quad (\text{Д4.4})$$

Звідси видно, що потенціал досягає значення, рівного контактного, не за $z \rightarrow \infty$, а в точці

$$z_0 = 1 - \exp\left[-\frac{Y_s + Y_k}{2}\right] \approx 1.$$

Розподіл носіїв у підкладці може бути описаний виразом

$$n(z) = N_d e^Y = \frac{N_d e^{Y_s}}{\left\{1 + z / \sqrt{2} \exp[(Y_s + Y_k) / 2]\right\}^2}, \quad (\text{Д4.5})$$

причому в точці z_0 справедлива рівність $n(z_0) = N_{d.\pi}$.

Крім того, з (Д4.5) випливає, що в рівноважному стані в підкладці є деякий надлишковий заряд, концентрація якого на межі «канал-підкладка» ($z = 0$) визначається зі співвідношення

$$n(0) \equiv n_s = N_d \exp(Y_s).$$

Середній за товщиною надлишковий заряд електронів визначимо за формулою

$$n_{cp} = \sqrt{N_{d.\pi} N_d e^{Y_s}} = \sqrt{N_{d.\pi} n_s}. \quad (\text{Д4.6})$$

Поверхневий потенціал Y_s можна розрахувати, розв'язуючи рівняння Пуассона для збідненого шару в каналі. Вважаючи, що збіднення не є глибоким, можна розподіл потенціалу описати експоненціальною функцією з характерною константою l_e , рівною довжині екранування для епітаксialного шару:

$$V(y) = V_s \exp\left(\frac{y - a}{l_e}\right). \quad (\text{Д4.7})$$

Співвідношення, що описує розподіл напруженості електричного поля в каналі, знайдемо з рівності (Д4.7), за $\mathcal{E}_s = |V_s| / l_e$:

$$\mathcal{E}(y) = -\frac{V_s}{l_e} \exp\left[\frac{y - a}{l_e}\right]. \quad (\text{Д4.8})$$

З урахуванням прийнятих раніше позначень, переходячи від змінної z до змінної y , з рівняння (Д4.4) отримаємо співвідношення для розподілу потенціалу в підкладці:

$$V(y) = V_s - 2 \frac{k_B T}{e} \ln \left\{ 1 + \frac{y - a}{l_{e.\pi}} \exp \left[\frac{e(V_s + V_k)}{2 k_B T} \right] \right\}. \quad (\text{Д4.9})$$

Скориставшись $dV(y)/dy = \mathcal{E}(y)$ з (Д4.9), отримаємо:

$$\mathcal{E}(y) = -\frac{2k_B T}{e l_{e.п}} \exp\left[\frac{e(V_s + V_k)}{2k_B T}\right] / \left\{1 + \frac{y-a}{l_{e.п}} \exp\left[\frac{e(V_s + V_k)}{2k_B T}\right]\right\}. \quad (\text{Д4.10})$$

Прирівнюючи між собою напруженості електричного поля на межі $y = a$, отримаємо:

$$V_s = \frac{\sqrt{2k_B T}}{e} \sqrt{\frac{N_{д.п}}{N_d}} \exp\left[\frac{e(V_s + V_k)}{2k_B T}\right]. \quad (\text{Д4.11})$$

Відповідно до нормованих потенціалів за $V_k = V_{k0}$ запишемо:

$$Y_{s0} = \sqrt{\frac{2N_{д.п}}{N_d}} \exp\left[\frac{e(Y_{s0} + Y_{k0})}{2}\right].$$

Оскільки $\sqrt{N_{д.п}} / N_d = \exp(-Y_{k0} / 2)$, то отримаємо трансцендентне рівняння відносно Y_{s0} , звідки $V_{s0} = -0,901k_B T/e$. Поверхнева концентрація за цього припущення визначається співвідношенням

$$n_{s0} = N_d e^{Y_{s0}} = N_d \exp\left(\frac{eV_{s0}}{k_B T}\right) \approx 0,406N_d,$$

а функції, що описують розподіли концентрації в каналі та у підкладці відповідно:

$$n(y) = N_d \exp\left[\frac{eV_{s0}}{k_B T} \exp\left(\frac{y-a}{l_e}\right)\right] \approx N_d \left[1 + \frac{eV_{s0}}{k_B T} \exp\left(\frac{y-a}{l_e}\right)\right]; \quad (\text{Д4.12})$$

$$n(y) = N_d \exp\left(\frac{eV_{s0}}{k_B T}\right) / \left\{1 + \frac{y-a}{l_{e.п}} \exp\left[\frac{e(V_{s0} + V_k)}{2k_B T}\right]\right\}^2. \quad (\text{Д4.13})$$

Рівняння для напруженості поля в підкладці (Д4.10) з урахуванням обчисленого значення V_{s0} запишемо так:

$$\mathcal{E}(y) = \left(\frac{|V_s|}{l_{e.п}}\right) \exp\left(\frac{eV_k}{2k_B T}\right) / \left\{1 + \frac{y-a}{l_{e.п}} \exp\left[\frac{e(V_{s0} + V_k)}{2k_B T}\right]\right\}. \quad (\text{Д4.14})$$

Розподіли потенціалу, напруженості електричного поля і концентрації носіїв поблизу межі «епітаксціальний шар-підкладка» в рівноважному стані показано на рис. Д4.1. Проте бар'єр

визначатиметься таким співвідношенням для контактної різниці потенціалів лише якщо немає чинників, що порушують рівновагу. Одним із таких чинників, що приводять до порушення рівноваги і виникнення явищ, певною мірою аналогічних термоелектричним ефектам, є розігрівання електронів електричним полем. Відмінність полягає в тому, що гріються лише електрони, а температура ґратки залишається постійною та однорідною. Ефекти, названі електроградієнтними, зумовлені різницею температур електронного газу. Градієнти температур у поперечній до межі епітаксiального шару з підкладкою площині, коли відбувається контакт напівпровідників з істотно різною концентрацією домішок, можуть виникати внаслідок різних умов розігрівання носіїв електричним полем. Ці умови пов'язані, насамперед, з малим внеском домішкового розсіювання в підкладці.

Термоелектрорушійна сила (термоерс) на nn^+ -переході може бути визначена співвідношенням²⁷ $V_T = V_{k0}(T_e/T - 1)$, де eV_{k0} – висота потенціального бар'єра nn^+ -переходу, $eV_{k0} = kT_e \ln(n^+/n)$; T_e – температура електронів.

Зазначимо, що це співвідношення отримане за припущення, що концентрація електронів не залежить від напруженості електричного поля. Проте якщо поздовжні поля в каналі та в підкладці транзисторної структури приблизно однакові, унаслідок різного ступеня розігрівання носіїв виникає поперечна термоерс, визначувана різницею температур електронного газу каналу й підкладки:

$$V_T = V_{k0} \left(\frac{T_k - T}{T} \right) - V_{k0} \left(\frac{T_{\Pi} - T}{T} \right) = V_{k0} \left(\frac{T_k - T_{\Pi}}{T} \right),$$

де T_k , T_{Π} – температура електронного газу в каналі й підкладці відповідно. Вираз для потенціалу бар'єра «канал-підкладка» з урахуванням розігрівання носіїв запишемо:

$$V_k = V_{k0} + V_T = V_{k0} \left(1 + \frac{T_k - T_{\Pi}}{T} \right). \quad (\text{Д4.15})$$

²⁷ Ашмонтас С. Электроградиентные явления в полупроводниках / под. ред. Ю. Пожелы. – Вильнюс : Мокслас, 1984. – 184 с. – (Электроны в полупроводниках; кн. 5).

Аналіз цього виразу показує, що за відсутності чинників, що приводять до розігрівання електронів або за однакових умов розігрівання ($T_k = T_n$), висота потенціального бар'єра на межі «канал–підкладка» визначається контактною різницею потенціалів V_{k0} , а у разі неоднорідного розігрівання висота потенціального бар'єра змінюватиметься за рахунок перерозподілу електронів між каналом і підкладкою.

Д4.2. Рівняння неперервності для каналу й підкладки

У загальному випадку між каналом і підкладкою хаотичний рух викликає взаємний обмін носіями за рахунок зустрічних потоків, тому виникає струм через межу в поперечному напрямку $j_{\perp} = j_{k,n} - j_{n,k}$, де $j_{k,n}$, $j_{n,k}$ – густина струму з каналу в підкладку і з підкладки в канал відповідно.

Проаналізуємо рівняння неперервності з урахуванням впливу підкладки. Для стаціонарного випадку ($\partial/\partial t = 0$) рівняння неперервності струму означає, що повний струм через замкнену поверхню дорівнює нулю:

$$\oint_s \vec{j} d\vec{s} = 0.$$

Інтегруючи за поверхнею S_1 (рис. 4.8, в), що обмежує елемент каналу довжиною dx , отримаємо рівняння

$$j_{\perp} + \frac{d(j_n)}{dx} = 0,$$

де j_{\perp} – поперечна складова струму, що проходить через межі розділу між каналом і підкладкою.

Аналогічне рівняння неперервності для підкладки набуде вигляду

$$\frac{d(j_n h_n)}{dx} - j_{\perp} = 0.$$

Основним механізмом обміну носіїв є тепловий рух, що відбувається за умови різних концентрацій і температур у каналі

й підкладці за наявності електричного поля. Результуючий струм через n^+ n -контакт може бути визначений з аналізу нерівноваги між процесами дрейфу й дифузії з урахуванням електроградієнтних ефектів.

Для виведення рівнянь, що забезпечують зв'язок за струмом між електронами каналу й підкладки, скористаємося співвідношенням для густини струму дрейфу і дифузії та отриманими виразами для напруженості електричного поля (Д4.8) і (Д4.10) й концентрації (Д4.13) і (Д4.14). Густина струму в підкладці з урахування (Д4.10) і (Д4.14) становить:

$$j_{др} = en\mu_{п} \frac{dV}{dy} = \frac{\sqrt{2}\mu_{п}k_{Б}Tn_{s0} \exp[(Y_{s0} + Y_{к}) / 2]}{\{1 + (z / \sqrt{2}) \exp[(Y_{s0} + Y_{к}) / 2]\}^3 l_{е.п}}. \quad (Д4.16)$$

Відповідно для дифузійного струму

$$j_D = eD_{п} \frac{dn}{dy} = -\frac{\sqrt{2}eD_{п}n_{s0} \exp[(Y_{s0} + Y_{к}) / 2]}{\{1 + (z / \sqrt{2}) \exp[(Y_{s0} + Y_{к}) / 2]\}^3 l_{е.п}}. \quad (Д4.17)$$

У результаті маємо, що струми дрейфу й дифузії врівноважуються у разі виконання співвідношення Ейнштейна $\mu k_{Б}T/e = D$.

Використовуючи вирази (Д4.8) і (Д4.13), для епітаксіального шару обчислимо густину дрейфової складової струму:

$$j_{др} = en\mu \mathcal{E} = -e\mu N_{д} \frac{V_{s0}}{l_e} \exp\left[\frac{eV_{s0}}{k_{Б}T} \exp\left(\frac{y-a}{l_e}\right)\right] \exp\left(\frac{y-a}{l_e}\right), \quad (Д4.18)$$

і дифузійної складової:

$$j_D = eD_{к} \frac{dn}{dy} = eD_{к}N_{д} \frac{eV_{s0}}{k_{Б}Tl_e} \exp\left[\frac{eV_{s0}}{k_{Б}T} \exp\left(\frac{y-a}{l_e}\right)\right] \exp\left(\frac{y-a}{l_e}\right). \quad (Д4.19)$$

Розрахуємо густину струмів $j_{к.п}$ та $j_{п.к}$, використовуючи результати, отримані в рівноважному наближенні. При цьому вважатимемо механізм «інжекції» носіїв на межі каналу з підкладкою дифузійним.

Скористаємося виразом (Д4.18) на границі ($y = a$) і вважаючи, що дифузія з каналу забезпечується за рахунок перевищення

поточної концентрації $n(x)$ над концентрацією донорів N_d унаслідок ефектів накопичення носіїв, запишемо:

$$j_{D_{к.п}} = \left(\frac{e|V_{s0}|}{k_B T} \right) \exp \left(\frac{eV_{s0}}{k_B T} \right) \frac{eD_{к}}{l_e} [n(x) - N_d]. \quad (Д4.20)$$

Зустрічний струм з підкладки в канал визначимо з (Д4.17) на межі з каналом ($z = 0$):

$$j_{D_{п.к}} = \frac{\sqrt{2}eD_{п}n_{s0}}{l_{e.п}} \exp \left[\frac{e(V_{s0} + V_{к})}{2k_B T} \right].$$

Тут, а також у співвідношеннях, наведених вище, $D_{к}$ і $D_{п}$ є коефіцієнтами дифузії для каналу й підкладки відповідно. Використовуючи замість поверхневої концентрації n_{s0} усереднене за підкладкою значення концентрації (Д4.6), а також з урахуванням ефектів накопичення в підкладці за рахунок розігрівання електричним полем дифузійну складову струму визначимо за формулою

$$j_{D_{п.к}} = \frac{\sqrt{2}eD_{п}}{l_{e.п}} [n_{п}(x) - n_{ср}] \exp \left[\frac{e(V_{s0} + V_{к})}{2k_B T} \right]. \quad (Д4.21)$$

Особливість отриманого виразу полягає в тому, що відповідно до формули (Д4.15) висота потенціального бар'єра залежить від різниці температур електронного газу в каналі та в підкладці. Висота потенціального бар'єра залежить від градієнта температур так, що для переважаючого розігрівання в каналі потенціальний бар'єр підвищується за рахунок інжектованих з каналу в підкладку носіїв. Переважаюче розігрівання в підкладці ($T_{п} > T_{к}$) приводить до повернення носіїв у канал і зниження потенціального бар'єра. Повернення електронів з підкладки в канал забезпечується також відповідно до виразу (Д4.20) за затвором, коли відбувається розширення каналу і поточне значення концентрації $n(x)$ може стати меншим від N_d . Знак струму $j_{к.п}$ при цьому змінюється на зворотний, що забезпечує швидку релаксацію струму в каналі.

Д4.3. Рівняння Пуассона для каналу і підкладки

Для аналізу рівняння Пуассона в каналі й підкладці розглянемо фрагмент області каналу і підкладки довжиною dx (рис. 4.8, з). Застосуємо теорему Гауса $\oint_s \vec{\mathcal{E}} d\vec{s} = -q(x)/\varepsilon\varepsilon_0$ до областей каналу (поверхня S_1). Для усереднених за поперечним перерізом каналу значень напруженості поздовжнього електричного поля і припущення про відсутність поперечної складової поля на межі з підкладкою, отримаємо рівняння Пуассона:

$$\frac{d(\mathcal{E}h)}{dx} = \frac{eh}{\varepsilon\varepsilon_0} [n(x) - N_d]. \quad (\text{Д4.22})$$

Аналогічно для підкладки (поверхня S_2 , рис. 4.8, в) запишемо рівняння

$$\frac{d(\mathcal{E}_\pi h_\pi)}{dx} = \frac{eh_\pi}{\varepsilon\varepsilon_0} [n_\pi(x) - N_{d,\pi}] + \mathcal{E}_\perp. \quad (\text{Д4.23})$$

Використовуючи отриманий з рівноважного аналізу результат для середнього надлишкового заряду електронів за товщиною підкладки (Д4.7), отримаємо рівняння Пуассона для підкладки у вигляді

$$\frac{d(\mathcal{E}_\pi h_\pi)}{dx} = \frac{eh_\pi}{\varepsilon\varepsilon_0} [n_\pi(x) - \sqrt{N_{d,\pi} n_s}]. \quad (\text{Д4.24})$$

Поточна концентрація у підкладці $n_\pi(x)$ є усередненим за товщиною підкладки значенням концентрації електронів, зміна якої пов'язана як з інжекцією носіїв із каналу, так і з ефектами накопичення через розігрівання і зміну ефективної маси. Товщина підкладки, що входить у рівняння (Д4.24), у першому наближенні може бути розрахована як довжина екранування в підкладці, якщо відома концентрація домішок у ній. Ефективна товщина для практичних розрахунків може становити 0,15...0,25 мкм, що можна отримати з формули для довжини екранування у підкладці, використовуючи співвідношення (Д4.6) для середнього надлишкового заряду.

Розглянемо процедуру розрахунку висоти провідної частини каналу і підкладки. У наближенні плавного каналу товщина збідненої області визначається різницею потенціалів затвора і поточного потенціалу каналу, тому

$$h(x) = a - \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{eN_d}[(V_b - V_{gs} + V(x))]} \quad (\text{Д4.25})$$

У режимі перекриття каналу слід розраховувати товщину збідненого шару, що проникає у підкладку. Для цього розглянемо одновимірну задачу про типовий режим, коли заряд у збідненій області визначається лише іонізованими донорними атомами (рис. 4.5). Розв'язок рівняння Пуассона в цьому випадку має такий вигляд для епітаксialного шару:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dy} &= -\left(\frac{eN_d}{\varepsilon\varepsilon_0}\right)y + C_1; \\ V(y) &= -\left(\frac{eN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0}\right)y^2 + C_1y + V_s, \end{aligned}$$

і для підкладки:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dy} &= -\left(\frac{eN_{d,\Pi}}{\varepsilon\varepsilon_0}\right)(y - d_\Pi); \\ V(y) &= -\left(\frac{eN_{d,\Pi}}{2\varepsilon\varepsilon_0}\right)(y - d_\Pi)^2, \end{aligned}$$

де V_s – потенціал затвора щодо каналу з урахуванням бар'єрного потенціалу; d_Π – товщина збіднення. «Зшиваючи» отримані рішення на межі «епітаксialний шар–підкладка» ($y = a$), отримуємо два рівняння відносно C_1 і d_Π , звідки

$$d_\Pi^2 = a^2 + \frac{N_d}{N_{d,\Pi}}(d_0^2 - a^2) = a^2 + \frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{eN_{d,\Pi}}(|V_s| - V_p), \quad (\text{Д4.26})$$

де $d_0 = \sqrt{2\varepsilon\varepsilon_0|V_s|/eN_d}$ – товщина шару збіднення в однорідному матеріалі з концентрацією домішки N_d .

Недоліком отриманого з одновимірного аналізу результату є швидке зростання d_Π і різке перекриття підкладки за умови,

що потенціал $|V_s|$ вищий від $|V_p|$. Це пояснюється тим, що концентрація в підкладці у приповерхневому шарі дорівнює $N_{дп}$. Проте, якщо врахувати в (Д4.26) збагачений шар у підкладці, розподіл концентрації електронів в якому описано формулою (Д4.5), то перекриття підкладки буде плавним за малих значень z і зростатиме у міру спадання функції $n(z)$.

Д4.4. Рівняння збереження енергії та імпульсу для каналу і підкладки

Для аналізу процесів, пов'язаних з ефектами «сплеску» дрейфової швидкості й розігрівання носіїв, потрібно в систему вихідних рівнянь квазідвовимірної моделювання включити рівняння балансу енергії та імпульсу:

$$\frac{dE}{dt} = e\mathcal{E}v - \left(\frac{E - E_0}{\tau_E} \right); \quad (\text{Д4.27})$$

$$\frac{dp}{dt} = \frac{e\mathcal{E} - p}{\tau_p}. \quad (\text{Д4.28})$$

У квазідвовимірному наближенні середня енергія електронів у загальному випадку залежить від поздовжньої координати і часу, тому

$$dE = \frac{\partial E}{\partial t} dt + \frac{\partial E}{\partial x} dx.$$

У стаціонарному випадку ($\partial/\partial t = 0$) за $dx/dt = v$ рівняння (Д4.27) набуває вигляду

$$\frac{dE}{dx} = e\mathcal{E} - \left(\frac{E - E_0}{v\tau_E} \right). \quad (\text{Д4.29})$$

Перший доданок у правій частині (Д4.29) характеризує енергію, що електрон набуває в поздовжньому полі каналу, друге – втрати енергії за рахунок розсіяння. Структура квазідвовимірної моделі, яка описує колективи електронів каналу та підкладки і їх взаємодію, вимагає включення в рівняння збереження енергії (Д4.29) членів, що враховують «переміщення» потоків. Істотна з цього погляду наявність потенціального бар'єра в підкладці.

Для аналізу цього явища розглянемо елемент каналу довжиною dx (див. рис. 4.8, *г*).

Через лівий переріз елемента потік електронів за одиницю часу переносить енергію, пропорційну $E I_K$, а через правий переріз – $(E + dE)(I_K + dI_K)$. За рахунок переходу частини електронів з каналу в підкладку через межу виходить енергія $E dI_K$. Електрони, що повертаються в канал з підкладки, прискорюються полем контактної різниці, їх енергія в каналі дорівнюватиме сумі кінетичної енергії у підкладці та енергії, набутій за час їх «скочування» з потенціального бар'єра ΔU . Тому ці електрони мають енергію, пропорційну $(E_{\Pi} + \Delta U) dI_{\Pi.K}$. Складаючи з цих доданків рівняння балансу (на рис. 4.8, *а* позначено «фізичні» напрямки струмів, які відповідають напрямку руху носіїв):

$$(E + dE)(I_K + dI_{\Pi.K} - dI_{K.\Pi}) + E I_{K.\Pi} = E I_K + (E_{\Pi} + \Delta U) dI_{\Pi.K},$$

отримаємо, що на ділянці dx каналу за рахунок обміну носіями відбувається зміна кінетичної енергії на

$$dE = \frac{E_{\Pi} - E_K + \Delta U}{I_K} dI_{\Pi.K}. \quad (Д4.30)$$

Проводячи аналогічні розрахунки для ділянки підкладки довжиною dx і враховуючи, що електрони, переходячи з каналу в підкладку, зменшують свою енергію, можна отримати:

$$dE_{\Pi} = -(E_{\Pi} - E + \Delta U) dI_{K.\Pi} / I_{\Pi}. \quad (Д4.31)$$

У результаті замість (Д4.29) отримуємо рівняння балансу енергії для каналу:

$$\frac{dE}{dx} = e\mathcal{E} - \frac{E - E_0}{v\tau_E} + \frac{(E_{\Pi} - E + \Delta U)}{I_K} \frac{dI_{\Pi.K}}{dx}, \quad (Д4.32)$$

і для підкладки:

$$\frac{dE_{\Pi}}{dx} = e\mathcal{E}_{\Pi} - \frac{E_{\Pi} - E_0}{v_{\Pi}\tau_E} + \frac{(E - E_{\Pi} - \Delta U)}{I_{\Pi}} \frac{dI_{K.\Pi}}{dx}. \quad (Д4.33)$$

У цих виразах ΔU є деякою середньою потенціальною енергією електронів у підкладці, яка визначається як контактним потенціальним бар'єром «епітаксіальний шар–підкладка», так і термоерс, що зумовлено електроградієнтними ефектами.

Сумарна висота бар'єра визначається з урахуванням розігрівання в каналі й підкладці за співвідношенням (Д4.15).

Отримані результати характеризують важливу особливість транзисторів із напівізолювальною підкладкою. Її зручно виявити, отримавши з (Д4.30) і (Д4.31) вираз для зміни середньої енергії всіх електронів:

$$dE_{\Sigma} = \frac{I_{\kappa}dE + I_{\Pi}dE_{\Pi}}{I_{\Pi} + I_{\kappa}} = \frac{(E_{\Pi} - E_{\kappa} + eV_{\kappa})d(I_{\Pi,\kappa} - I_{\kappa,\Pi})}{I_{\Pi} + I_{\kappa}}. \quad (\text{Д4.34})$$

З цього виразу видно, що за інжекції електронів із каналу в підкладку ($dI_{\kappa,\Pi} > dI_{\Pi,\kappa}$) відбувається зменшення енергії носіїв, що зумовлює охолодження електронного потоку. І попри те, що у разі повернення несів у канал потенціальна енергія знову перетворюється на кінетичну і потік розігрівається, все ж частина носіїв рухається в області з малою концентрацією домішки, де їх рухливість вища через зменшення домішкового розсіяння. Це дозволяє отримувати більші значення дрейфової швидкості, а отже й крутизни, і зрештою покращує підсилювальні й шумові властивості транзистора.

Рівняння збереження імпульсу (Д4.28) може бути для стаціонарного випадку так само, як і рівняння збереження енергії, зведене до вигляду

$$\frac{dp}{dx} = \frac{e\mathcal{E}}{v} - \frac{p}{v\tau_p}, \quad (\text{Д4.35})$$

де p – середнє значення поздовжньої складової імпульсу електронів, яка збільшується в електричному полі й зменшується за рахунок розсіяння. Під час переходу електронів між каналом і підкладкою поздовжня складова імпульсу не змінюється, але в загальному випадку вона має різні значення в каналі й підкладці. Тому в рівнянні балансу треба врахувати їх зміну за рахунок «змішування» потоків. Для цього можна навести для імпульсів такі ж міркування, що і для енергії (не враховуючи змін, що відбуваються в полі контактної різниці потенціалів), і в результаті отримати:

$$dp = \frac{(p_{\Pi} - p)}{I_{\kappa}} dI_{\Pi,\kappa}; \quad (\text{Д4.36})$$

$$dp_{\Pi} = -\frac{(p_{\Pi} - p)}{I_{\Pi}} dI_{\kappa.\Pi}. \quad (\text{Д4.37})$$

Відповідно, увівши ці зміни в рівняння (Д4.35), запишемо рівняння балансу імпульсу для каналу й підкладки:

$$\frac{dp}{dx} = \frac{e\mathcal{E}}{v} - \frac{p}{v\tau_p} + \frac{p_{\Pi} - p}{I_{\kappa}} \left(\frac{dI_{\Pi.\kappa}}{dx} \right); \quad (\text{Д4.38})$$

$$\frac{dp_{\Pi}}{dx} = \frac{e\mathcal{E}_{\Pi}}{v_{\Pi}} - \frac{p_{\Pi}}{v_{\Pi}\tau_{p\Pi}} - \frac{p_{\Pi} - p}{I_{\Pi}} \left(\frac{dI_{\kappa.\Pi}}{dx} \right). \quad (\text{Д4.39})$$

Зазвичай у підкладці через меншу роль домішкового розсіяння швидкість дрейфу вища, ніж у каналі, тому описане явище викликає деяке загасання імпульсу в підкладці й посилення його в каналі.

Крім того, відмінність в імпульсі зумовлена не лише відмінністю швидкостей електронів, але й ефективних мас ($p = m^* v$; $p_{\Pi} = m_{\Pi}^* v_{\Pi}$), тому вказаний ефект послаблюється через те, що ефективна маса електронів у каналі дещо вища, ніж у підкладці, оскільки розігрівні явища в каналі зазвичай виявляються сильнішими.

Д4.5. Розрахунок малосигнальних параметрів

Крутизна і вихідна провідність. Малосигнальні параметри можуть бути розраховані за результатами квазідвовимірного моделювання за відомими приростами потенціалів, струмів і зарядів на різних ділянках транзистора (рис. Д4.2). Для аналізу використовуються прирости, пов'язані з витоковим і стоковим краями затвора.

Формула для повного диференціала струму стоку може бути записана у такому вигляді:

$$dI(V_{gs}, V_{ds}) = \frac{\partial I}{\partial V_{gs}} dV_{gs} + \frac{\partial I}{\partial V_{ds}} dV_{ds} = S_0 dV_{gs} + G_d dV_{ds}.$$

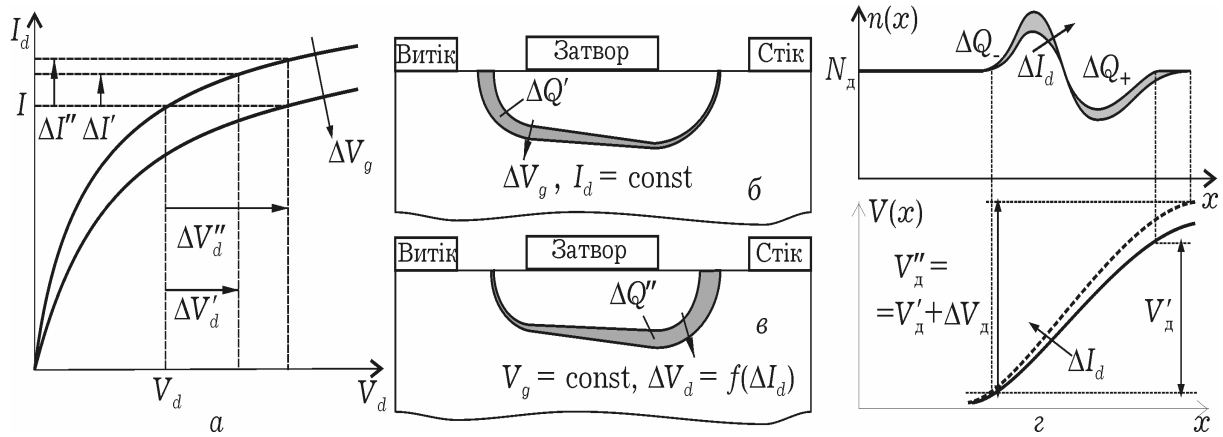


Рис. Д4.2. До розрахунку приростів потенціалів і струму для визначення крутизни і вихідної провідності (а), приростів заряду для визначення ємностей C_{gs} ; і C_{gd} (б і в відповідно) і параметрів домена (г)

Переходячи від диференціалів до скінченних приростів $dV_{gs} \rightarrow \Delta V_{gs}$, $dV_{ds} \rightarrow \Delta V_{ds}$ необхідно, даючи прирости ΔI та ΔV_g , стежити за зміною напруги V_{ds} з урахуванням $V_{gs} = V_g - V_s$ і $V_{gd} = V_g - V_d$.

Перепишемо початкове співвідношення у скінченних різницях:

$$\Delta I = S_0 \Delta V_{gs} + G_d \Delta V_{ds} \quad \text{або} \quad \Delta V_{ds} = \frac{\Delta I}{G_d} - M \Delta V_{gs},$$

де $M = S_0 / G_d$.

Зміна струму стоку на величину ΔI за постійного потенціалу затвора викличе зміну потенціалів у точках s і d так, що $V'_{gs} = V_g - V'_s$; $V'_{gd} = V_g - V'_d$. З останнього рівняння отримаємо

$$V'_{ds} - V_{ds} = M(V'_s - V_s) + \frac{\Delta I}{G_d}.$$

Для приросту ΔV_g за постійного струму стоку ($\Delta I = 0$) отримаємо

$$V''_{ds} - V_{ds} = M(V''_s - V_s - \Delta V_g).$$

Щоб знайти параметри S_0 і G_d , потрібно спільно розв'язати наведені рівняння.

Динамічна крутизна S , що є параметром схемної моделі,

повинна враховувати запізнювання фази зміни струму за рахунок скінченного часу прольоту електронів у каналі:

$$\tau = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\Delta x}{v_i} \right),$$

а також ту обставину, що напруга джерела напруги, що безпосередньо керує, V_{gs} , є лише частиною вхідної напруги на ланцюгу $R_i C_{gs}$, тому

$$S = \frac{S_0 e^{-i\omega\tau}}{1 + i\omega R_i C_{gs}},$$

де R_i – опір відкритої частини каналу. Динамічна крутизна може бути також розрахована за формулою

$$S = S_0 \frac{\sin(\omega\tau/2)}{\omega\tau/2} e^{-i(\omega\tau/2)}.$$

Вхідна і прохідна ємності, параметри домену. Розглянемо структуру транзистора для розрахунку потенціалів як показано на рис. Д4.2.

Оскільки весь заряд іонізованих донорів у збідненій області залежить від потенціалів затвора V_g і стоку V_d , то

$$dQ = \frac{\partial Q}{\partial V_d} d(V_g - V_d) + \frac{\partial Q}{\partial V_g} dV_{gs} = C_{gd} d(V_g - V_d) + C_{gs} dV_{gs}.$$

З рівняння для повного заряду можна отримати два рівняння, що відповідають приростам, відповідно струму ΔI і вхідній напрузі:

$$\Delta Q' = C_{gd} \Delta V'_{gd} + C_{gs} \Delta V'_{gs};$$

$$\Delta Q'' = C_{gd} \Delta V''_{gd} + C_{gs} \Delta V''_{gs}.$$

Застосовуючи підхід, аналогічний описаному для визначення S_0 і G_d для ємностей C_{gs} і C_{gd} , отримаємо

$$\begin{cases} \Delta Q' = C_{gs} \Delta V'_s + C_{gd} \Delta V'_d; \\ \Delta Q'' = C_{gs} (\Delta V''_s - \Delta V_g) - C_{gd} (\Delta V_d - \Delta V''_d). \end{cases}$$

Тут введено такі позначення: для приросту струму стоку ΔI зміни потенціалів мають вигляд

$$\begin{cases} \Delta V'_{gd} = (V_g - V'_d) - (V_g - V_d) = V_d - V'_d; \\ \Delta V'_{gs} = (V_g - V'_s) - (V_g - V_s) = V_s - V'_s, \end{cases}$$

а для приросту напруги ΔV_g відповідно

$$\begin{cases} \Delta V''_{gd} = (V_g - V''_d) - (V_g + \Delta V_g - V_d) = V_d - V''_d - \Delta V_g; \\ \Delta V''_{gs} = (V_g - V''_s) - (V_g + \Delta V_g - V_s) = V_s - V''_s - \Delta V_g. \end{cases}$$

Опір області сильного поля (домену) R_d і ємності C_d визначають через зміну заряду ΔQ_d і зміну спаду напруги на області домену ΔV_d , які сягають зі зміною струму стоку величини ΔI_d за постійної напруги затвора:

$$R_d = \frac{\Delta V_d}{\Delta I_d}; \quad C_d = \frac{\Delta Q_d}{\Delta V_d}.$$

Методику розрахунку відповідних приростів заряду і потенціалів зображено на рис. Д4.2, з.

Приріст потенціалу в області домену знаходимо за формулою

$$V''_d = V'_d + \Delta V_d.$$

Паразитні параметри. Металізацію затвора зазвичай описують комплексним опором $Z_g = R_g + j\omega L_g$, де $R_g = 3\rho_m W\lambda L/\delta_m$; ρ_m – питомий опір металізації затвора; δ_m – товщина шару металізації.

Для алюмінієвого затвора з урахуванням скін-ефекту опір металізації

$$R_g = \left[\frac{17W_{\pi}}{\delta_m LW_{\text{сп}}} + \frac{1,3W_{\pi}}{W_{\text{сп}}} \left(\frac{f}{\delta_s L} \right)^{1/2} \right],$$

де f – частота, ГГц; L – довжина затвора, мкм; W_{π} – ширина одного пальця; $W_{\text{сп}}$ – спільна ширина затвора; δ_s – глибина скін-шару, $\delta_s = \sqrt{2\rho_m/\omega\mu_{\pi}}$; μ_{π} – магнітна проникність на частоті ω . Для алюмінієвого затвора глибина скін-шару становить 1,4...1,9 мкм на частоті 2 ГГц.

Опір омичних контактів стоку і витоку визначимо за формулами

$$R_s = \frac{L_{в.з}}{eN_d \mu_k (a - a_0)W}; \quad R_d = \frac{L_{з.с}}{eN_d \mu_k (a - a_0)W},$$

де a_0 – висота шару збіднення за рахунок поверхневих станів на вільних межах; μ_k – рухливість носіїв у каналі; $L_{в.з}$ – відстань «витік–затвор»; $L_{з.с}$ – відстань «затвор–сток».

Вихідну ємність транзистора можна визначити як

$$C_{ds} = \varepsilon_0(\varepsilon_r + 1)W \frac{K(k')}{K(k)},$$

де K – повний еліптичний інтеграл першого роду, відносна діелектрична проникність арсеніду галію $\varepsilon_r = 12,9$. Додаткову функцію K' можна розрахувати за формулами

$$K'(k) = K(k'); \quad k' = \sqrt{1 - k^2}; \quad k = \operatorname{th} \left(\frac{\pi L}{2b} \right),$$

де b – величина зазору конденсатора, утвореного контактними площадками витоку і стоку; L – довжини контактних площадок витоку і стоку, $L = L_c = L_v$:

$$\frac{K(k)}{K'(k)} = \begin{cases} \left[\frac{1}{\pi} \ln \left(2 \frac{1 + \sqrt{k'}}{1 - \sqrt{k'}} \right) \right]^{-1} & \text{за } 0 \leq k \leq 0,7; \\ \frac{1}{\pi} \ln \left(2 \frac{1 + \sqrt{k}}{1 - \sqrt{k}} \right) & \text{за } 0,7 \leq k \leq 1. \end{cases}$$

Повний опір виводів, наприклад із золота, з урахуванням скін-ефекта може бути оцінений за формулою

$$Z_{\text{вив}} = 3,1 \cdot 10^{-5} (1 + i) \sqrt{f} \frac{l}{2r},$$

де f – частота, ГГц; l – довжина виводів; r – радіус поперечного перерізу.

Додатки до розділу 5

Д5.1. Алгоритм чисельного моделювання гетероструктурних транзисторів

Рівняння фізико-топологічних моделей субмікронних структур у двовимірному наближенні є рівнянням у частинних похідних різних порядків.

Найбільші труднощі виникають з розв'язанням диференціальних рівнянь у частинних похідних другого порядку через великі похибки їх чисельних апроксимацій. Рівняння у частинних похідних другого порядку в нестационарному випадку записують у вигляді рівняння гіперболічного типу:

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla(b \nabla u) + cu = f,$$

де a , b , c – константи; f – константа або функція просторових координат; u – вектор невідомих.

Рівняння Пуассона і неперервності у стаціонарному випадку належать до рівнянь у частинних похідних еліптичного типу, до яких зводяться гіперболічні рівняння за $\partial^2 u / \partial t^2 = 0$.

Канонічна форма еліптичних рівнянь:

$$-\nabla(b \nabla u) + cu = f,$$

така форма відповідає структурі рівнянь неперервності струму для електронів і дірок. Для $c = 0$ отримаємо:

$$-\nabla(b \nabla u) = f,$$

що відповідає рівнянню Пуассона для потенціалу.

Розв'язання наведених рівнянь у двовимірній області зі складною функцією у правій частині, що задає розподіл густини заряду, зазвичай пов'язаний із застосуванням чисельних методів, що мають заданий крок дискретизації й неоднорідні граничні умови.

Для аналізу субмікронних ефектів у транзисторах із високою рухливістю електронів використовують систему двовимірних рівнянь, отриману з урахуванням релаксаційних процесів, яка включає рівняння збереження енергії, імпульсу та частинок.

Часи релаксації визначають, враховуючи переважаючі механізми розсіяння – міждолинне і полярне оптичне.

Для моделювання розподілу потенціалу в структурі й розв’язання рівняння Пуассона враховують розрив енергетичних зон на межі вузькозонного і широкозонного напівпровідників заввишки близько 0,4 еВ. Висота бар’єра залежить від властивостей напівпровідникових матеріалів, які утворюють гетероперехід.

Процедура дискретизації та подання рівнянь у скінченно-різницевому вигляді дозволяє звести диференціальні рівняння в частинних похідних до системи алгебричних рівнянь:

$$\mathbf{V} = \mathbf{F},$$

де \mathbf{K} – матриця коефіцієнтів, \mathbf{F} – матриця відомих величин або функцій. При цьому залежно від складності топологічної структури модельованої області субмікронної структури можуть використовуватися різні методи генерації скінченно-різницевої сітки. Для модельованої області зі складною конфігурацією кращими є метод скінченних елементів²⁸, що передбачає тріангуляцію. Для досить простих областей можна використовувати метод скінченних різниць із процедурою дискретизації з прямокутною сіткою. Обидва підходи найчастіше реалізуються з можливістю використання адаптивної зміни кроку сітки. Особливо це актуально в областях з великими градієнтами модельованих функцій і в примежових областях. Можна показати²⁹, зокрема на прикладі рівняння Пуассона, що різницеві рівняння обох методів відрізняються лише способом урахування густини об’ємного заряду. У методі скінченних різниць густина заряду інтегрується безпосередньо по всій області вічка, а в методі скінченних елементів потрібне зважене інтегрування в більшій області, включаючи сусідні елементи. Тобто за однакових апроксимацій обидва методи дають фактично однакові результати. Вибір методу

²⁸ *Зенкевич О.* Конечные элементы и аппроксимация / О. Зенкевич, К. Морган: пер. с англ. – М. : Мир, 1986. – 318 с.

Марчук Г. И. Введение в проекционно-сеточные методы / Г. И. Марчук, В. И. Агошков. – М. : Наука, 1981. – 416 с.

²⁹ *Бубенников А. Н.* Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем / А. Н. Бубенников. – М. : Высш. шк., 1989. – 320 с.

розбиття зумовлений необхідністю апроксимації області зі складною конфігурацією, а також тим, що сильні поля локалізуються в області з розмірами 0,2...0,3 мкм біля стокового краю затвора, де потрібна дрібніша сітка.

Метод скінченних елементів ґрунтується на побудові апроксимації рішення u варіаційної задачі у скінченновимірних підпросторах S_D , що містяться в області D . В основі варіаційних методів лежить перехід від задачі для рівняння з частинними похідними до задачі мінімізації функціонала. Функціоналом для рівняння Пуассона у двовимірному наближенні вигляду

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$$

є інтеграл³⁰

$$I(u) = \iint_D \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - 2uf \right] dx dy = \iint_D F \left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right) dx dy.$$

Необхідною умовою мінімальності інтеграла $I(u)$ є те, що функція $u(x, y)$ задовольняє рівняння Ейлера–Лагранжа:

$$\frac{\partial}{\partial x} F_{ux} + \frac{\partial}{\partial y} F_{uy} - F_u = 0.$$

Підпростори S_D будуються за допомогою ділення модельованої області на скінченні елементи – трикутники. З ними пов'язується сукупність вузлів – вершин трикутника (можуть також використовуватися середини сторін, центри ваги елементів). На множині скінченних елементів будуються простори кусково-поліноміальних однотипних функцій – лінійних, квадратичних, кубічних або сплайнів за кожною змінною в межах одного елемента, їх коефіцієнти виражаються через значення самих функцій або їх похідних у вузлах. Ці функції фінітні, тобто відмінні від нуля тільки в околі, обмеженому декількома сусідніми елементами.

Для лінійної базисної функції у підобласті, що має вигляд трикутника з вершинами P_1, P_2, P_3 із заданими значеннями

³⁰ Бабенко К. И. Основы численного анализа / К. И. Бабенко. – М. : Наука, 1986. – 744 с.

u_1, u_2, u_3 функції $u(x, y)$, апроксимація є поліномом:

$$\tilde{u}(x, y) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y, \quad (\text{Д5.1})$$

коефіцієнти якого можуть бути виражені через u_i з розв'язку системи рівнянь $\tilde{u}(P_i) = u_i$, $i = 1, 2, 3$:

$$\alpha_1 = \frac{1}{S_{ijk}} [(x_j x_k - x_k y_i) u_i + (x_k x_i - x_i y_k) u_j + (x_i x_j - x_j y_i) u_k];$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{S_{ijk}} [(y_i - y_k) u_i + (y_k - y_i) u_j + (y_i - y_j) u_k];$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{S_{ijk}} [(x_k - x_j) u_i + (x_i - x_k) u_j + (x_j - x_i) u_k],$$

де i, j, k – номери вершин; S_{ijk} – площа трикутника. Поліном (Д5.1) може бути виражений через базисні функції:

$$\tilde{u}(x, y) = \sum_{i=1}^3 u_i p_i(x, y),$$

де p_i – лінійний за x, y багаточлен, рівний одиниці в i -му вузлі та нулю в інших:

$$p_i(x, y) = \left(\frac{1}{C_{ijk}} \right) (\alpha_{ik} + \beta_{ik} x + \gamma_{ik} y) = \frac{D_{ik}}{C_{ijk}}, \quad (\text{Д5.2})$$

де $\alpha_{ik} = x_i x_k - y_j x_k$; $\beta_{ik} = x_k - y_j$; $\gamma_{ik} = y_i - y_k$;

$$D_{jk} = \begin{bmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{bmatrix}; \quad C_{ijk} = \begin{bmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{bmatrix}.$$

Поширюючи алгоритм визначення $p_i(x, y)$ для кожного l -го вузла тріангуляції модельованої області, будують кусково-лінійну функцію $\Psi_l(x, y)$, рівну одиниці в l -му вузлі та нулю в інших. При цьому в кожному з примикаючих (прилеглих) трикутників ця функція визначається за формулою (Д5.2). Сукупність таких функцій утворює базис простору S_D кусково-лінійних функцій для всіх вузлів тріангуляції, за винятком тих, що лежать на межі області.

Порядок інтерполяції підвищується, якщо окрім u_i у вер-

шинах трикутників використовується також значення на середині сторін P_4, P_5, P_6 . У цьому випадку

$$\tilde{u}(x, y) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 y + \beta_3 x^2 + \beta_4 xy + \beta_5 y^2,$$

де всі β_i визначаються з рівнянь $\tilde{u}_j(x_j, y_j) = u_j, j = 1, 2, \dots, 6$. Для квадратичної функції $p_i^{(2)}(x, y)$ за кожною змінною, рівною одиниці в p_i і нулю в інших, базисна функція може бути записана як

$$\tilde{u}(x, y) = \sum_{i=1}^6 u_i p_i^{(2)}(x, y),$$

де $p_i^{(2)}$ виражається через $p_i(x, y)$ як

$$p_i^{(2)}(x, y) = p_i(2p_i - 1); \quad j = 1, 2, 3;$$

$$p_4^{(2)}(x, y) = 4p_1 p_2; \quad p_5^{(2)}(x, y) = 4p_2 p_3; \quad p_6^{(2)}(x, y) = 4p_3 p_1.$$

Отже, сукупність $p_i^{(2)}(x, y)$ у трикутниках зі спільними вузлами утворює базисну функцію простору кусково неперервних функцій.

Шукане рішення:

$$u(x, y) = u_1 \phi_1(x, y) + u_2 \phi_2(x, y) + \dots + u_n \phi_n(x, y),$$

де ϕ_i – кусково-лінійні базисні функції. Триангуляція проводиться так, що межа сіткової області збігається з межею розрахункової області. Крім того, сіткові вузли лежать як на зовнішній межі, так і на лініях поділу різних середовищ («метал-напівпровідник»).

Під час триангуляції використовується адаптивна процедура зменшення кроку сітки до досягнення заданої точності, при цьому порівнюються потенціали у сусідніх точках в області з найбільшим значенням градієнта потенціалу.

Розглянемо процедуру отримання варіаційного рівняння для рівняння у частинних похідних еліптичного типу, адаптовану до рівняння Пуассона. Записане в матричній формі з урахуванням описаного раніше алгоритму дискретизації це рівняння визначає алгоритм розв'язання рівнянь Пуассона і неперервності.

У найзагальнішому випадку для неоднорідних граничних умов 3-го роду

$$\vec{n}(c\nabla u) + qu = g,$$

де g, q – функції, визначені на області D ; \vec{n} – нормаль до поверхні, варіаційне рівняння для N базисних функцій ($\varphi_i \in V_N$):

$$\int_D (c\nabla u) \cdot \nabla \varphi_i + au\varphi_i - f\varphi_i dx - \int_{\partial D} (-qu + g)\varphi_i ds = 0, \quad i = 1, \dots, N,$$

де N – розмірність простору V_N ,
тоді

$$u(x) = \sum_{j=1}^N U_j \varphi_j(x).$$

Отримаємо систему рівнянь:

$$\sum_{j=1}^N \left[\int_D ((c\nabla \varphi_j) \cdot \nabla \varphi_i + a\varphi_j \varphi_i) dx + \int_{\partial D} q\varphi_j \varphi_i ds \right] U_j = \int_D f\varphi_i dx + \int_{\partial D} g\varphi_i ds,$$

де $i = 1, \dots, N$. Позначивши

$$K_{i,j} = \int_D (c\nabla \varphi_j) \cdot \nabla \varphi_i dx; \quad M_{i,j} = \int_D a\varphi_j \varphi_i dx;$$

$$Q_{i,j} = \int_{\partial D} q\varphi_j \varphi_i ds; \quad F_i = \int_D f\varphi_i dx;$$

$$G_i = \int_{\partial D} g\varphi_i ds,$$

де матрицями коефіцієнтів $K_{i,j}$ і $M_{i,j}$ є матриці жорсткості та матриці мас, отримаємо систему рівнянь у матричній формі:

$$(\mathbf{K} + \mathbf{M} + \mathbf{Q})\mathbf{U} = \mathbf{F} + \mathbf{G}, \quad (\text{Д5.3})$$

при цьому матриця коефіцієнтів у лівій частині системи перед \mathbf{U} має діагональне переважання.

Проте, щоб отримати прийнятну точність апроксимації, слід брати досить багато доданків, що утруднює процес інтегрування.

Зазначмо, що точність наближення у методі скінченних елементів залежить не від збільшення кількості базисних функцій (або гармонік у наведеному базисі), а від розміру околу, де базисна функція відмінна від нуля.

Розв'язок систем нелінійних апроксимаційних рівнянь вигляду (Д5.3) найчастіше пов'язаний з різними модифікаціями методу Ньютона. Залежно від системи вихідних рівнянь для опису субмікронних структур використовують різні методи й алгоритми.

Після отримання розв'язку із заданою точністю для потенціалів (рівняння Пуассона) і концентрації (рівняння неперервності) спільно розв'язується система рівнянь із розрахунком на кожному кроці коефіцієнта дифузії та рухливості електронів. Алгоритм розв'язку системи рівнянь Пуассона і рівняння неперервності з урахуванням апроксимацій і рівняння для напруженості електричного поля є декількома вкладеними циклами. Кожне з цих рівнянь, у свою чергу, є системою скінченно елементних рівнянь великої розмірності. Розріджені матриці систем мають діагональне переважання і стрічкову структуру. Для розв'язку систем використовується метод прогону в поєднанні з ітераційним багатокроковим методом Ньютона.

Алгоритм розв'язання системи рівнянь локальної фізико-топологічної моделі може бути поданий такими етапами.

Крок 1. Тріангуляція модельованої області із заданим кроком і розрахунок профілів легувальної домішки.

Крок 2. Розв'язання рівняння Пуассона для рівноважного розподілу концентрації носіїв (перша ітерація).

Крок 3. Розрахунок розподілу напруженості електричного поля в структурі $\mathcal{E}(x, y)$ і рухливостей носіїв за заданих механізмів розсіяння, а також за заданих значень концентрації та профілів легувальної домішки.

Крок 4. Розв'язання рівнянь неперервності струму із заданою точністю і визначення розподілів концентрації носіїв $n(x, y)$.

Крок 5. Узгоджене розв'язання системи рівнянь, що складається з рівнянь Пуассона і неперервності.

Крок 6. Розрахунок струмів на електродах і перевірка виконання закону Кірхгофа для струмів, оцінювання похибки обчислень. Якщо заданої точності не досягнуто, здійснюється дроблення кроку дискретизації тріангулярної сітки і перехід до кроку 1.

Отже, знаходять розподіли концентрації носіїв і потенціалу для заданої структури. Вихід із зовнішнього циклу здійснюється за умови досягнення функцією $\varphi(x, y)$ мінімуму.

Для знаходження розподілу концентрації носіїв використовують метод Ньютона. У простому випадку цей метод описується такою формулою:

$$n_{i+1} = n_i - F_i'^{(-1)} F_i.$$

Проте через наявність великих градієнтів функцій найбільш придатним є метод Ньютона–Рафсона із дробленням кроку, оскільки в ньому закладено адаптацію кроку для кожного вузла сітки:

$$n_{i+1} = n_i - \alpha_i F_i'^{(-1)} F_i,$$

де цільова функція $F_i = \rho / \varepsilon \varepsilon_0 \phi$. Величину α_i обирають так, щоб забезпечити спадання цільової функції на кожній ітерації. Цей вибір пов'язаний з перевіркою нерівності

$$f(x_i + \alpha_i p_i) - f(x_i) \leq \delta \cdot \alpha_i (f'(x_i), p_i),$$

де $p_i = -(f''(x_i))^{-1} f'(x_i)$ – напрям спуску, а $0 < \delta < S$ – деяке задане число, спільне для всіх ітерацій. Якщо ця нерівність виконана за $\alpha_i = 1$, то крок беруть рівним одиниці й здійснюють наступну ітерацію. Якщо ні – крок дробиться доти, поки вона не виконається.

Якщо ітераційний процес погано збігається, то використовується прискорений метод Ньютона третього порядку³¹:

$$x_{i+1} = x_i - F_i'^{-1} F_i - \frac{1}{2!} F_i'^{-1} F_i'' (F_i'^{-1} F_i) (F_i'^{-1} F_i), \quad i = 0, 1, 2.$$

Метод має швидку збіжність, однак досягти з його допомогою заданої точності досить важко, тому його використовують для знаходження початкового наближення для методу Ньютона–Рафсона із дробленням кроку.

Для розв'язання початкової системи рівнянь нелокальної двовимірної моделі ГСПТ застосовують метод ітерацій (послідовних наближень). Оскільки у ці рівняння входить якась функція від координат $z(x, y)$ та її перша похідна, то можна записати $z = f(z)$, тоді z_n виражатиметься через z_{n-1} за рекурентною формулою³² $z_n = f(z_{n-1})$.

³¹ Иванов В. В. Методы вычислений на ЭВМ : Справоч. пособие / В. В. Иванов. – К. : Наук. думка, 1986. – 584 с.

³² Ильин В. А. Итерационные методы решения функциональных уравнений // Соросовский образовательный журнал. – М. : 2001. – № 2. – С. 116–120.

Вихідний струм транзистора розраховують як нормальну складову струму до контакту стоку за відомими двовимірними розподілами концентрації електронів, напруженості електричного поля і рухливості за результатами розв'язання вихідної системи рівнянь до досягнення заданої точності розв'язання у вузлах сітки.

Додатки до розділу 7

Д7.1. Виведення формули Цу–Есакі

1. Обчислення струму, що його створюють електрони з лівого резервуара $J_{LR}(z)$:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{J}_{LR}(z) &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) g(\mathbf{k}) f_{\Phi-D}(\mathbf{k}, E_\Phi) dk_z dk_x dk_y = \\
 &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{\mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) dk_z dk_x dk_y}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
 &= \left| \frac{dk_z dk_x dk_y}{k_r} = k_r dk_z dk_x dk_y \right| = \\
 &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) dk_z \int_0^\infty \frac{k_r dk_r}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} \int_0^{2\pi} dk_\phi = \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) dk_z \int_0^\infty \frac{dk_r^2}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
 &= \left| \frac{u = \left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T}{du = \frac{\hbar^2}{2m^* k_B T} dk_r^2, \quad E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i0}} \right| = \\
 &= \frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) dk_z \int_{\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{\hbar^2 / 2m^*}}^\infty \frac{du}{e^u + 1} = \left| \int \frac{du}{e^u + 1} = \ln(e^{-u} + 1) \right| = \\
 &= \frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) \ln\left(\exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}\right) + 1\right) dk_z = \left| dk_z = \frac{\sqrt{m^*}}{\sqrt{2}\hbar} \frac{dE_z}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \right| = \\
 &= \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^\infty \frac{\mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}\right)\right) dE_z.
 \end{aligned}$$

2. Обчислення струму, що його створюють електрони з правого резервуара $J_{RL}(z)$:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{J}_{RL}(z) &= \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) g(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}, E_{\Phi}) dk_z dk_x dk_y = \\
 &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) dk_z dk_x dk_y}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i5} - (E_{\Phi} + U_N)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
 &= \left| \frac{dk_z dk_x dk_y = k_r dk_z dk_r dk_{\phi}}{k_r = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \right| = \\
 &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^0 \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) dk_z \int_0^{\infty} \frac{k_r dk_r}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i5} - (E_{\Phi} + U_N)\right) / k_B T\right) + 1} \int_0^{2\pi} dk_{\phi} = \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^0 \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) dk_z \int_0^{\infty} \frac{dk_r^2}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i5} - (E_{\Phi} + U_N)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
 &= \left| \frac{u = \left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i5} - (E_{\Phi} + U_N)\right) / k_B T,}{du = \frac{\hbar^2}{2m^* k_B T} dk_r^2, \quad E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i5}} \right| = \\
 &= \frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^0 \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) dk_z \int_{\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_N)}{k_B T}}^{\infty} \frac{du}{e^u + 1} = \left| \int \frac{du}{e^u + 1} = \ln(e^{-u} + 1) \right| = \\
 &= \frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^0 \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) \ln\left(\exp\left(-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_N)}{k_B T}\right) + 1\right) dk_z = \left| dk_z = -\frac{\sqrt{m^*}}{\sqrt{2}\hbar} \frac{dE_z}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \right| = \\
 &= -\frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{U_{i5}} \frac{\mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_N)}{k_B T}\right)\right) dE_z = \\
 &= \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} \frac{\mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_N)}{k_B T}\right)\right) dE_z.
 \end{aligned}$$

Усі позначення взято з рис. 7.14.

Д7.2. Скінченно-різницева схема

для системи рівнянь обвідної хвильової функції

За умови, коли участь у перенесенні заряду беруть електрони з двох долин (для визначення «Г» та «Х»), щоб урахувати перемішування електронних станів на гетеромежах, слід розв'язати таку систему рівнянь відносно обвідних хвильових

функцій ψ_Γ та ψ_X ³³:

$$\left\{ \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\psi_\Gamma}{dz} + \left(V_\Gamma(z) - E + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2mm_\Gamma}}_{-E_z^\Gamma} \right) \psi_\Gamma + \alpha \delta(z_k) \psi_X &= 0; \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{mm_X} \frac{d\psi_X}{dz} + \left(V_X(z) - E + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2mm_X}}_{-E_z^X} \right) \psi_X + \alpha \delta(z_k) \psi_\Gamma &= 0, \end{aligned} \right. \quad (D7.1)$$

де $m_{\Gamma(X)}$ – відносна ефективна маса в $\Gamma(X)$ -долині; m – маса спокою електрона; k – номери точок, що належать гетеромежам, $k = i_1, i_2, \dots, i_{N_b}$ (N_b – кількість таких меж); α – стала міждолинної взаємодії, [eV·Å]; $\delta(z)$ – дельта-функція Дірака.

Для більшої наочності викладок будемо вважати, що $k_\parallel^2 = 0$, тож $E_z^\Gamma = E_z^X \equiv E_z$ (як позначено в (D7.1)), з таким припущенням $\psi_{\Gamma(X)}$ є функціями лише координати z та поперечної енергії E_z .

На гетеромежах ці рівняння мають задовольняти узагальнені граничні умови, що накладаються на обвідні хвильових функцій ψ_Γ (ψ_X)⁸:

$$\psi_\Gamma|_{z_k^-} = \psi_\Gamma|_{z_k^+}; \quad (D7.2)$$

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\psi_\Gamma}{dz} \right)_{z=z_k^+} - \left(\frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\psi_\Gamma}{dz} \right)_{z=z_k^-} \right] + \alpha \psi_X|_{z=z_k} = 0. \quad (D7.3)$$

Перепишемо перше з рівнянь системи (D7.1) у вигляді

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m_\Gamma} \frac{d\psi_\Gamma}{dz} + \frac{2m(E_z - V_\Gamma(z))}{\hbar^2} \psi_\Gamma - \frac{2m}{\hbar^2} \alpha \delta(z_k) \psi_X = 0, \quad (D7.4)$$

та будемо шукати для нього скінченно-різницеву схему на нерегулярній сітці $\{z_i, i = 1, 2, \dots, N\}$, де N – кількість вузлів дискретної сітки.

³³ Liu H. C. Resonant tunneling through single layer heterostructure / H. C. Liu // Appl. Phys. Letters. – 1987. – Vol. 51. – N 13. – P. 1019–1021.

Введемо позначення:

$$\begin{aligned} k(z) &\equiv \frac{1}{m_{\Gamma}(z)}; \\ q(z) &\equiv \frac{2m}{\hbar^2} (V_{\Gamma} - E_z); \\ f(x) &\equiv -\frac{2m}{\hbar^2} \alpha \delta(z_k) \psi_x(z). \end{aligned} \quad (\text{Д7.5})$$

У них (Д7.4) перепишемо так:

$$\frac{d}{dz} k(z) \frac{d\psi_{\Gamma}(z)}{dz} - q(z) \psi_{\Gamma}(z) = -f(z). \quad (\text{Д7.6})$$

Будь-яке триточкове рівняння, що відповідає (Д7.6), може бути записане у такому вигляді³⁴:

$$\frac{1}{\bar{h}_i} \left(b_i(z) \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h_{i+1}} - a_i(z) \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h_i} \right) - d_i(z) \psi_i(z) + \varphi_i(z) = 0, \quad (\text{Д7.7})$$

де $a_i(z)$, $b_i(z)$, $d_i(z)$, $\varphi_i(z)$ – шукані різницеві функції, що можуть у загальному випадку залежати від трьох значень координати: z_{i-1} , z_i та z_{i+1} ; $h_i = z_i - z_{i-1}$; $\bar{h}_i = (h_i + h_{i-1}) / 2$.

Для того, щоб скінченно-різницева схема (Д7.7) задовольняла умову консервативності та самоспряженості скінченно-різницевого оператора, необхідно, щоб $b_i(z) = a_{i+1}(z)$. Тоді вона буде описувати рівняння збереження деякої фізичної величини ω в діапазоні $z \in \Omega$, де $\Omega: [z_{i-1/2}; z_{i+1/2}]$:

$$\omega_{i+1/2} - \omega_{i-1/2} - \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} q(z) \psi(z) dz = - \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} f(z) dz, \quad (\text{Д7.8})$$

де $\omega = k(z)u'(z)$; рівняння (Д7.8) еквівалентне закону збереження потоку ймовірності. Легко побачити, що, стягуючи область Ω у точку, із виразу (Д7.8) отримаємо (Д7.3).

Усю сукупність скінченно-різничевих схем другого порядку точності, що відповідають (Д7.6), можна записати у такому вигляді³⁵:

³⁴ Самарский А. А. Введение в численные методы / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1987. – С. 150.

³⁵ Самарский А. А. Введение в численные методы / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1987. – С. 53.

$$\frac{1}{h_i} \left(a_{i+1}(z) \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{h_{i+1}} - a_i(z) \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h_i} \right) - d_i(z) \Psi_i(z) + \varphi_i(z) = 0, \quad (\text{Д7.9})$$

$$\text{де} \quad a_i = \left(\frac{1}{h_i} \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{dz}{k(z)} \right)^{-1}; \quad \varphi_i = \frac{1}{h_i} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} f(z) dz; \quad d_i = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(z) dz.$$

Далі, застосовуючи інтегро-інтерполяційний метод³⁶, можна замінити відповідні інтеграли їх скінченно-різницеви́ми апроксимаціями. У цьому разі важливо, щоб усі точки z_k потрапляли у вузли сітки, оскільки функція $f(z)$ містить у собі δ -функцію, яка перетворюється в нуль усюди, крім точок z_k . Розглянемо апроксимацію за триточковою схемою у випадку, якщо *центральною точкою схеми збігається з гетеромежею*: $z_i = z_k$.

Враховуючи, що ефективна маса в цій точці зазвичай змінюється стрибкоподібно (функція $k(z)$ зазнає розриву I роду), а в інтервалах $z \in [z_{i-1}; z_i]$ і $z \in [z_i; z_{i+1}]$ достатньо гладка (зазвичай просто стала), найкращим наближенням для інтеграла a_i буде

$$a_i = k_{i-1/2}. \quad (\text{Д7.10})$$

У випадку, якщо ефективна маса в лівому та правому інтервалах не змінюється, можна точно покласти

$$a_i = k_{i-1}. \quad (\text{Д7.11})$$

Аналогічно можна покласти

$$a_{i+1} = k_{i+1}. \quad (\text{Д7.12})$$

Інтеграл φ_i , очевидно,

$$\varphi_i = \varphi_k = \frac{1}{h_i} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} \varphi(z) dz = -\frac{1}{h_i} \frac{2m}{\hbar^2} \alpha \Psi_X(z); \quad (\text{Д7.13})$$

$$d_i = \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} q(z) dz \approx q_i \equiv \frac{q_{i+1} + q_{i-1}}{2}. \quad (\text{Д7.14})$$

Усі разом формули (Д7.9)–(Д7.14) задовольняють другий порядок точності апроксимації диференціального рівняння скінченно-різницевою схемою. Підставляючи апроксимації інтегралів (Д7.10)–(Д7.14) у (Д7.9), отримаємо:

³⁶ Самарский А. А. Введение в численные методы / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1987. – С. 167.

$$\frac{1}{\bar{h}_i} \left(\frac{1}{m_{i+1}} \frac{(\psi_{\Gamma,i+1} - \psi_{\Gamma,i})}{h_{i+1}} - \frac{1}{m_{i-1}} \frac{(\psi_{\Gamma,i} - \psi_{\Gamma,i-1})}{h_i} \right) - q_i \psi_{\Gamma,i} + \varphi_i = 0. \quad (\text{Д7.15})$$

Провівши еквівалентні перетворення, вираз (Д7.15) можна записати так:

$$\psi_{\Gamma,i+1} + \beta \psi_{\Gamma,i-1} - (1 + \beta + h_{i+1} \bar{h}_i m_{i+1} q_i) \psi_{\Gamma,i} + h_{i+1} \bar{h}_i m_{i+1} \varphi_i = 0, \quad (\text{Д7.16})$$

де $\beta = h_{i+1} m_{i+1} / h_i m_{i-1}$.

Повертаючись до початкових позначень відповідно до (Д7.5), отримаємо скінченно-різницеву схему (Д7.16) для всіх точок $i = k$:

$$a_k \psi_{\Gamma,k-1} + b_k \psi_{\Gamma,k} + c_k \psi_{\Gamma,k+1} = d_k \psi_{X,k}, \quad (\text{Д7.17})$$

де

$$\begin{aligned} a_{\Gamma,k} &= \frac{h_{k+1} m_{k+1}}{h_k m_{k-1}}; \\ b_{\Gamma,k} &= -1 - \frac{h_{k+1}}{h_k} \frac{m_{k+1}}{m_{k-1}} + \frac{h_{k+1} \bar{h}_k m_{k+1} 2m(E - V_{\Gamma,k})}{\hbar^2}; \\ c_{\Gamma,k} &= 1; \\ d_{\Gamma,k} &= -\frac{2n_{k+1} m_{k+1} m\alpha}{\hbar^2}. \end{aligned}$$

Ще раз зазначимо, що схема (Д7.17) з коефіцієнтами, що наведені під нею, має використовуватися лише для точок з індексами $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_{Nb}\}$, тобто для гетеромеж. Ці точки індексують через k , щоб не плутати зі «звичайними» внутрішніми точками.

Для усіх інших точок (тобто для $i \notin \{i_1, i_2, \dots, i_{Nb}\}$) у випадку, якщо ефективна маса в межах шарів залишається незмінною, в рівнянні (Д7.17) необхідно покласти $m_{i+1} = m_{i-1} = m_i$, звідки отримаємо

$$a_i \psi_{\Gamma,i-1} + b_i \psi_{\Gamma,i} + c_i \psi_{\Gamma,i+1} = 0, \quad (\text{Д7.18})$$

де

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{h_{i+1}}{h_i}; \\ b_i &= -1 - \frac{h_{i+1}}{h_i} + \frac{h_{i+1} h_i m_i 2m(E - V_{\Gamma,i})}{\hbar^2}; \\ c_i &= 1. \end{aligned}$$

Зауважимо, що ця схема придатна для всіх точок, крім $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_{Nb}\}$.

Формули (Д7.17) та (Д7.18) дозволяють зіставити перше з рівнянь (Д7.1) з його скінченно-різничевою схемою у всіх внутрішніх точках. Для її отримання було виконано всі умови, щоб вона мала другий порядок точності, в чому можна безпосередньо переконатися.

Для того, щоб отримати скінченно-різничеву схему для другого рівняння системи (Д7.1), потрібно у формулах (Д7.17) та (Д7.18) скрізь поміняти місцями індекси «X» та «Г».

Для того, щоб отримати скінченно-різничеву схему з регулярною сіткою, що має крок h , необхідно в рівняннях (Д7.17) та (Д7.18) покласти $h_{i-1} = h_i = h_{i+1} \equiv h$.

Нарешті, якщо в (Д7.17) покласти $\alpha = 0$, то це рівняння буде описувати скінченно-різничеву схему для $\Gamma(X)$ -долини однодолинної моделі (формула (Д7.17) при цьому не зміниться).

Д7.3. Рівняння, що замикають скінченно-різничеву схему

Рівняння, що замикають скінченно-різничеву схему, яка відповідає рівнянню Шредінгера для обвідної хвильової функції, можуть бути отримані з умов неперервності хвильової функції та її першої похідної в точках, що є лівою та правою межами «квантової» області пристрою, z_0 та z_5 відповідно³⁷:

$$\begin{cases} \psi^I(z_0) = \psi^{II}(z_0); \\ \frac{1}{m^I(z_{0-})} \frac{d\psi^I(z_0)}{dz} = \frac{1}{m^{II}(z_{0+})} \frac{d\psi^{II}(z_0)}{dz}; \end{cases} \quad (\text{Д7.19})$$

$$\begin{cases} \psi^{II}(z_5) = \psi^{III}(z_5); \\ \frac{1}{m^{II}(z_{5-})} \frac{d\psi^{II}(z_5)}{dz} = \frac{1}{m^{III}(z_{5+})} \frac{d\psi^{III}(z_5)}{dz}, \end{cases} \quad (\text{Д7.20})$$

де $\psi^{I,II,III}$, $m^{I,II,III}$ – хвильові функції та ефективні маси у лівому резервуарі, квантовій області та правому резервуарі. Надалі

³⁷ Lent C. S. The quantum transmitting boundary method / C. S. Lent, D. J. Kirkner // Journal of Applied Physics. – 1990. – Vol. 67. – P. 6353–6359.

не буде вказано, в якій точці береться ефективна маса, оскільки це й так зрозуміло.

У резервуарах вид хвильової функції відомий: це суперпозиція хвиль де Бройля; у квантовій області хвильова функція позначається через ψ^{II} , саме вона шукається за допомогою скінченно-різницевої схеми, рівняння для крайніх точок якої тут виводяться.

Для електронів з *лівого резервуара*:

$$\psi_L(z) = \begin{cases} \psi^{\text{I}}(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\} + r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, z < z_0; \\ \psi^{\text{II}}(z), z \in [z_0; z_5]; \\ \psi^{\text{III}}(z) = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}, z > z_5, \end{cases} \quad (\text{Д7.21})$$

де $k_{L(R)} = \sqrt{2m_{L(R)}^*(E_z - U_{i0(i5)})} / \hbar$. При цьому $\psi^{\text{II}}(z)$ визначається в дискретних точках $\psi_i = \psi_{\text{II}}(z_i) = \psi_{\text{II}}\{\Delta(i - 1)\}$ чисельним методом.

Знайдемо рівняння *лівої межі* для електронів з *лівого резервуара*.

Враховуючи вирази (Д7.21) та (Д7.19), перепишемо:

$$\begin{cases} 1 + r_L = \psi_1; \\ ik_L(1 - r_L)\alpha = \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta}, \end{cases} \quad (\text{Д7.22})$$

де $\alpha = m_{\text{II}}/m_{\text{I}}$. У другому рівнянні (Д7.22) було використано апроксимацію похідної:

$$\frac{d\psi^{\text{II}}(z_0)}{dz} \approx \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta}.$$

Виключаючи з (Д7.22) r_L , знаходимо рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для ψ_L ліворуч:

$$(i\alpha k_L \Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2i\alpha k_L \Delta,$$

а також вираз для «комплексного коефіцієнта відбивання» r_L : $r_L = \psi_1 - 1$.

Коефіцієнт відбивання (ймовірність відбивання) електрона від лівої границі активної області³⁸

³⁸ Ландау Л. Д. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М. : Физматгиз, 1963. — С. 101.

$$R_{LR} = \frac{|j_{\leftarrow}^I|}{|j_{\rightarrow}^I|},$$

де $j_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$ – густина потоку ймовірності, що відповідає прямій: $\psi_{\rightarrow}^I(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\}$ та зворотній: $\psi_{\leftarrow}^I(z) = -r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\}$ хвилям в першій області та визначається як³⁹

$$j = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (\text{Д7.23})$$

Для знаходження $j_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$ під ψ у (Д7.23) слід розуміти $\psi_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$. Провівши обчислення, отримаємо:

$$R_{LR} = |r_L|^2 = |\psi_1 - 1|^2.$$

Знайдемо рівняння для *правої межі* для електронів з *лівого резервуара*. Враховуючи вираз (Д7.21), рівняння (Д7.20) перепишемо:

$$\begin{cases} \psi_N = t_L; \\ \frac{m_{\text{III}}}{m_{\text{II}}} \frac{(\psi_N - \psi_{N-1})}{\Delta} = t_L ik_R, \end{cases}$$

де було використано апроксимацію похідної

$$\frac{d\psi^{\text{II}}(z_5)}{dz} \approx \frac{\psi_N - \psi_{N-1}}{\Delta}.$$

З цієї системи отримаємо рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для ψ_L праворуч:

$$(ik_R \Delta - \alpha) \psi_N = \alpha \psi_{N-1} = 0, \quad (\text{Д7.24})$$

де $\alpha = m_{\text{III}}/m_{\text{II}}$.

Коефіцієнт проходження (ймовірність проходження) електрона через активну область

$$T_{LR} = \frac{|j_{\rightarrow}^{\text{III}}|}{|j_{\rightarrow}^I|},$$

де $j_{\rightarrow}^{\text{III}}$ – густина потоку ймовірності, що відповідає хвилі, яка падає на активну область $\psi_{\rightarrow}^I(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\}$ (пройшла через

³⁹ Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики: учеб. пособие / Д. И. Блохинцев. – М. : Наука, 1976. – С. 122.

активну область $\psi_{\rightarrow}^{\text{III}} = \psi^{\text{III}} = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}$) та визначається відповідно до виразу (Д7.23). Обчислення дають

$$T_{LR} = \frac{k_R}{k_L} \frac{m_L}{m_R} |t_L|^2 = \frac{k_R}{k_L} \frac{m_L}{m_R} |\psi_N|^2. \quad (\text{Д7.25})$$

Для електронів з *правого* резервуара

$$\psi_R(z) = \begin{cases} \psi^{\text{I}}(z) = t_R \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, & z < z_0; \\ \psi^{\text{II}}(z), & z \in [z_0; z_5]; \\ \psi^{\text{III}}(z) = r_R \exp\{ik_R(z - z_5)\} + \exp\{-ik_R(z - z_5)\}, & z > z_5. \end{cases} \quad (\text{Д7.29})$$

Рівняння, що замикають скінченно-різницеву схему для ψ_R , можуть бути отримані з виразів (Д7.19), (Д7.20) та (Д7.26).

Знайдемо рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему *лівої межі* для електронів, що інжектуються з *правого резервуара*. Враховуючи (Д7.26), вираз (Д7.19) перепишемо:

$$\begin{cases} t_R = \psi_1; \\ \frac{m_{\text{I}}}{m_{\text{II}}} \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta} = -ik_L t_R, \end{cases}$$

звідки можна отримати рівняння, яке замикає скінченно-різницеву схему для ψ_R зліва:

$$(ik_L \Delta - \alpha) \psi_1 + \alpha \psi_2 = 0,$$

де $\alpha = m_{\text{I}}/m_{\text{II}}$.

Аналогічно до того, як було отримано вираз (Д7.25), можна отримати вираз для ймовірності проходження електрона через активну область зліва направо:

$$T_{RL} = \frac{k_L}{k_R} \frac{m_R}{m_L} |t_R|^2 = \frac{k_L}{k_R} \frac{m_R}{m_L} |\psi_1|^2. \quad (\text{Д7.27})$$

Враховуючи вираз (Д7.26) та (Д.20), перепишемо:

$$\begin{cases} \psi_N = 1 + r_R; \\ \frac{m_{\text{III}}}{m_{\text{II}}} \frac{\psi_N - \psi_{N-1}}{\Delta} = ik_R (r_R - 1), \end{cases}$$

де $\alpha = m_{\text{III}}/m_{\text{II}}$. Виключаючи r_R , отримаємо рівняння, що замиканє скінченно-різницеву схему для ψ_R праворуч:

$$\alpha\psi_{N-1} + (ik_R\Delta - \alpha)\psi_N = 2ik_R\Delta.$$

Імовірності відбиття електрона від правої межі квантової області

$$R_{RL} = |r_R|^2 = |\psi_N - 1|^2. \quad (\text{Д7.28})$$

Для подальшого викладу результатів потрібно зробити зауваження стосовно коефіцієнтів проходження та відбиття від меж квантової області. Для більш широкого класу систем, ніж та, що нами розглядається, відомо, що:

$$T_{RL} = T_{LR} \equiv T; \quad R_{RL} = R_{LR} \equiv R.$$

Останні рівності випливають з того, що вирази для хвильової функції у I та III областях є формами розв'язання одного й того самого диференціального рівняння (Шредінгера).

Зауважимо, що з (Д7.24), (Д7.25) та (Д7.27), (Д7.28) випливають такі корисні співвідношення:

$$|t_R|^2 = \frac{k_R}{k_L} T = \frac{k_R}{k_L} (1 - R); \quad |t_L|^2 = \frac{k_L}{k_R} T = \frac{k_L}{k_R} (1 - R).$$

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Москалюк В. А. Физика электронных процессов: учеб. пособие / В. А. Москалюк, Ю. С. Синеккоп, Р. Кассинг. – Ч. I. – Электронные состояния. – К. : УкрИНТЭИ, 2001. – 148 с.
2. Зеегер К. Физика полупроводников / К. Зеегер: пер. с англ. – М. : Мир, 1977. – 616 с.
3. Иващенко В. М. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло / В. М. Иващенко, В. В. Митин. – К. : Наук. думка, 1990. – 192 с.
4. Бонч-Бруевич В. Л. Физика полупроводников: учеб. пособие для вузов / В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. – 2-е изд., перераб. и доп. – М. : Наука; Гл. ред. физ.-мат. л-ры, 1990. – 688 с., ил. – ISBN 5-02-014032-5.
5. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия / М. Шур; пер. с англ. – М. : Мир, 1991. – 632 с.
6. Хокни Р. Численное моделирование методом частиц / Р. Хокни, Дж. Иствуд; пер. с англ. – М. : Мир, 1987. – 640 с.
7. Прохоров Э. Д. Полупроводниковые материалы для приборов с междолинным переносом / Э. Д. Прохоров, Н. И. Белецкий. – Х. : Вища шк.; Изд. при Харьк. ун-те, 1982. – 144 с.
8. Москалюк В. О. Фізика електронних процесів. Динамічні процеси / В. О. Москалюк. – К. : Політехніка, 2004. – 180 с.
9. *Fransson J.* Non-orthogonality and electron correlations in nanotransport. Spin- and time-dependent currents / J. Fransson // Dissertation for the Degree of Doctor of Philosophy in Physics presented at Uppsala University. – Uppsala, Sweden, 2002. – 101 p.
10. *Sun J.* Resonant tunneling diodes: models and properties / J. P. Sun, R. K. Mains, G. I. Haddad // Proc. of IEEE. – 1998. Vol. 86. – P. 641–661.
11. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники. V. Резонансно-туннельные структуры / И. И. Абрамов // Нано- и микросистемная техника. – 2007. – № 3. – С. 57–70.
12. Федяй А. В. Моделі резонансно-тунельних діодів

(аналiтичний огляд). Кiнетичнi моделi / А. В. Федяй // *Електроника и связь*. – 2007. – № 5. – С. 11–16.

13. *Landauer R.* Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conductor / R. Landauer // *IBM Journal of Research and Development*. – 1957. – Vol. 1. – p. 233.

14. *Meir Y.* Landauer formula for the current through an interacting electron region / Y. Meir, N. S. Wingreen // *Phys. Rev. Lett.* – 1992. – Vol. 68. – P. 2512–2515.

15. *Hirose K.* First-principle calculation in real-space formalism / K. Hirose, Tomoya Ono, Y. Fujimoto, S. Tsukamoto // London: Imperial College Press. – 2005. – 253 p.

16. *Pinaud O.* Transient simulation of resonant-tunneling diode / O. Pinaud // *J. Appl. Phys.* – 2002. – Vol. 92. – N 4. – P. 1987–1994.

17. *Абрамов И. И.* Комбинированная модель резонансно-туннельного диода / И. И. Абрамов, И. А. Гончаренко, Н. В. Коломейцева // *Физика и техника полупроводников*. – 2005. – Т. 39. – Вып. 9. – С. 1138–1145.

18. *Москалюк В. О.* Прикладна програма для моделювання переносу заряду в квантоворозмiрних гетероструктурах з графiчним iнтерфейсом користувача / В. О. Москалюк, А. В. Федяй, О. Ю. Ярошенко // *Електроника и связь; тематич. вып. «Електроника и нанотехнологии»*. – 2011. – № 1. – С. 48–53.

19. *Likharev K. K.* Single-electron devices and their applications / K. K. Likharev // *Proc. Of IEEE*. – 1999. – Vol. 87. – P. 606–632.

20. *Шалимова К. В.* Физика полупроводников: учеб. пособие для вузов / К. В. Шалимова. – М. : Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.

21. *John H. Davis.* The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction / Davis H. John. – Cambridge University Press, 2005. – 438 p.

22. *Ландау Л. Д.* Теоретическая физика: учеб. пособие для вузов. В 10 т. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская

теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – 5-е изд., стереотип. – М. : Физматлит, 2002. – 808 с.

23. *Bastard G.* Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures / G. Bastard. – Halsted Press, New York, 1988. – 357 p.

24. *Петров Г. В.* Основные направления в моделировании субмикронных полевых транзисторов с затвором Шоттки / Г. В. Петров, А. И. Толстой // Изв. ВУЗов. Сер. «Радиоэлектроника». – 1986. – Т. 29. – № 10. – С. 28–42.

25. *Pucel R. A.* Signal and noise property of GaAs microwave field-effect transistors. Adv. in electronics and Electron Physics / R. A. Pucel, H. A. Haus, H. Statz. – 1975. – N-Y.; Acad. Press. – Vol. 38. – P. 195–265.

26. *Sugeta T.* Microwave performance GaAs-Shottky barrier gate FET's / T. Sugeta, M. Ida, M. Uchida. – Rev. Electron Common. Lab. – 1975. – Vol. 23. – N 11/12. – P. 1182–1192.

27. *Carnez B.* Modeling of a submicrometer gate-field transistors including effects of nonstationary Electron dynamics / B. Carnez, A. Cappy, A. Kaszynski et al. // J. Appl. Phys. – 1980. – Vol. 51. – N 1. – P. 784–790.

28. *Кальфа А. А.* Исследование вольт-амперных характеристик полевых транзисторов с субмикронным затвором / А. А. Кальфа, А. Б. Пашковский, А. С. Тагер // Электронная техника. Сер. I «Электроника СВЧ». – 1984. – Вып. 4 (364). – С. 27–30.

29. *Москалюк В. А.* Моделирование процессов переноса электронов в канале и подложке субмикронного полевого транзистора / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Электронная техника. Сер. «Электроника СВЧ». – 1990. – Вып. 2 (426). – С. 22–27.

30. *Гарбер Г. З.* Моделирование работы полевых транзисторов с субмикронным затвором Шоттки на арсениде галлия / Г. З. Гарбер // Электронная техника. Сер. 2. «Полупроводниковые приборы». – 1985. – Вып. 2. – С. 103–107.

31. *Мартынов Я. Б.* Двумерная численная модель статических и высокочастотных характеристик полевого транзистора с затвором Шоттки / Я. Б. Мартынов // Электронная техника. Сер. I. «Электроника СВЧ». – 1984. – Вып. 4 (364). – С. 29–32.

32. Москалюк В. А. Программа моделирования полупроводниковых приборов субмикронных размеров многочастичным методом Монте-Карло / В. А. Москалюк, В. В. Минаков, В. Т. Касиян // Электронная техника. Сер. I. «Электроника СВЧ». – 1988. – Вып. 8 (412). – С. 71–73.

33. Москалюк В. А. Распределенная модель СВЧ полевого транзистора / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев, И. Д. Шовкун // Изв. вузов. Сер. «Радиоэлектроника». – 1986. – Т. 29. – № 6. – С. 87–89.

34. Москалюк В. А. Моделирование СВЧ полевого транзистора с топологическими неоднородностями / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Автоматизация проектирования в электронике. – 1985. – Вып. 32. – С. 92–96.

35. Иващук А. В. Вплив морфології омiчних контактiв на надвисокочастотнi параметри польових транзисторiв / А. В. Иващук, В. І. Тимофєєв // Оптоелектроника и полупроводниковая техника. – 2000. – № 35. – С. 157–161.

36. Иващук А. В. Вплив морфології омiчних контактiв на шуми гарячих електронiв в транзисторних структурах / А. В. Иващук, А. Матуленiс, В. І. Тимофєєв // Электроника и связь. – 1999. – № 7. – С. 96–99.

37. Гусельников Н. А. О создании системы моделирования твердотельных СВЧ-приборов / Н. А. Гусельников, В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Автоматизация проектирования в электронике. – 1993. – Вып. 48. – С. 15–21.

38. Сигорский В. П. Моделирование электронных компонентов в системах автоматизированного проектирования / В. П. Сигорский // Изв. вузов. Сер. «Радиоэлектроника». – 1986. – Т. 29. – № 6. – С. 3–15.

39. Сигорский В. П. Проблемная адаптация в системах автоматизированного проектирования / В. П. Сигорский // Изв. вузов. Сер. «Радиоэлектроника». – 1988. – Т. 31. – № 6. – С. 5–22.

40. Braunstein R. Moore, A. R., Herman, F.: Phys. Rev. – N 109. – 1958. – P. 695.

-
41. *Ортмонд Б. Ф.* Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников / Б. Ф. Ортмонд; пер. с англ; под ред. В. М. Глазова. – М. : Высш. шк., 1982. – 323 с.
42. *Пасынков В. В.* Материалы электронной техники / В. В. Пасынков, В. С. Сорокин. – М. : Высш. шк., 1986. – 311 с.
43. *Vurgaftman I.* Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys / I. Vurgaftman, J. R. Meyer // *J. Appl. Phys.* – 2001. – Vol. 89. – N 11. – P. 5815–5862.
44. *Vurgaftman I.* Band parameters for nitrogen-containing semiconductors / I. Vurgaftman, J. R. Meyer // *J. Appl. Phys.* – 2003. – Vol. 94. – N 4. – P. 3675–3691.
45. *Chen S.* High-field properties of carrier transport in bulk wurtzite GaN: A Monte Carlo perspective / S. Chen, G. Wanga // *J. Appl. Phys.* – 2008. – Vol. 103. – P. 023703-1-6.
46. Физикотехнический институт им. А. Ф. Иоффе РАН: New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties URL [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/>
47. *Давыдов С. Ю.* Оценки параметров нитридов элементов третьей группы: BN, AlN, GaN и InN / С. Ю. Давыдов // *Физика и техника полупроводников.* – 2002. – № 36. – Вып. 1. – С. 45–47.
48. *Persson C.* Effective electronic masses in wurtzite and zinc-blende GaN and AlN / C. Persson, A. Ferreira da Silva, R. Ahuja, B. Johansson // *J. Cryst. Grow.* – 2001. – N 231. – P. 397–406.
49. *Adachi S.* GaAs, AlAs, and AlGaAs: Material Parameters for Use in research and device Applications / S. Adachi // *J. App. Phys.* – N 58 (3). – 1 Aug. 1985. – R1.
50. *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов. В 2 кн. / С. Зи; пер. с англ. – М. : Мир, 1984. – Кн. 1. – 456 с.
51. *Zi J.* Condens Matter / J. Zi, X. Wan, G. Wei et al. – N 8. – 1996. – P. 6323–6328.
52. *Куликов К. В.* Высокочастотные параметры нитрида

галлия / К. В. Куликов, В. А. Москалюк // Техника и приборы СВЧ. – 2008. – № 2. – С. 48–52.

53. Матуленис А. Динамика разогрева электронов / А. Матуленис, Ю. Пожела, А. Реклайтис // Многодолинные полупроводники; под ред. Ю. Пожелы. – Вильнюс : Мокслас, 1978. – 204 с.

54. Bhapkar U. V. Monte Carlo calculation of velocity-field characteristics of wurtzite GaN / U. V. Bhapkar, M. S. Shur. – J. Appl. Phys. – Vol. 82. – N 4. – 1997. – P. 1649–1655.

55. Бонч-Бруевич В. Л. Физика полупроводников / В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. – М. : Наука, 1977. – 367 с.

56. Конуэлл Э. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях / Э. Конуэлл. – Пер. с англ. – М. : Мир, 1970. – 384 с.

57. Blakemore J. S. J. Appl. Phys. – Vol. 53. – N 10. – 1982. – P. R123–R181.

58. Kolnik J. Electronic transport studies of bulk zincblende and wurtzite phases of GaN based on an ensemble Monte Carlo calculation including a full zone band structure / J. Kolnik, I. H. Oguzman, K. F. Brennan, R. Wang, P. P. Ruden, Y. Wang // J. Appl. Phys. – N 78 (2). – 1995. – P. 1033–1038.

59. Прохоров Э. Д. Полупроводниковые материалы для приборов с междолинным переносом / Э. Д. Прохоров, Н. И. Белецкий. – Х. : Вища шк. ; Изд-во при Харьк. ун-те, 1982. – 144 с.

60. Данилин В. Транзисторы на GaN пока самый крепкий орешек / В. Данилин, Т. Жукова // Электроника: наука, технологии, бизнес. – 2005. – Т. 26. – Вып. 4. – С. 20–28.

61. Foutz B. E. Transient electron transport in wurtzite GaN, InN and AlN / B. E. Foutz, S. K. O’Leary, M. S. Shur, L. F. Eastman // J. of Appl. Phys. – Vol. 85. – N 11. – P. 7727–7734.

62. Shockley W. A unipolar field-effect transistor / W. Shockley // Proc. IRE. – N 40. – 1952. – P. 1365.

63. Минаков В. В. Программа моделирования полупроводниковых приборов субмикронных размеров многочастич-

ным методом Монте-Карло / В. В. Минаков, В. А. Москалюк, В. Т. Касиян // Электронная техника. Сер. 1. «Электроника СВЧ». – 1988. – Вып. 8 (412). – С. 71–73.

64. *Littlejohn M.* Velocity field characteristics of GaAs with $\Gamma_6^c - L_6^c - X_6^c$ conduction-band ordering / M. Littlejohn, J. Rauser, T. Glisson // J. Appl. Phys. – 1977. – Vol. 48. – N 11. – P. 4587–4590.

65. *Brennan K.* High field transport in GaAs, InP and InAs / K. Brennan, K. Hess // Solid State Electronics. – 1984. – Vol. 27. – N 27. – P. 347–350.

66. *Cook R. K.* An Efficient Technique for Two-Dimensional Simulation of Velocity Overshoot Effects in Si and GaAs Devices / R. K. Cook, J. Frey // COMPEL–The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering. – 1982. – Vol. 1. – N 2. – P. 65–87.

67. *Максименко А. Г.* О моделировании субпорогового режима ПТШ / А. Г. Максименко, В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Вестник КПИ. Сер. «Радиоэлектроника». – 1992. – № 29. – С. 15–18.

68. *Москалюк В. А.* Модель полевого транзистора с барьером Шоттки при открытом затворе / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Вестник КПИ. Сер. «Радиоэлектроника». – 1994. – № 30. – С. 7–10.

69. *Москалюк В. А.* Анализ моделей субмикронных полевых транзисторов с позиций адаптивного проектирования / В. А. Москалюк, В. В. Минаков, В. И. Тимофеев // Изв. ВУЗов. Сер. «Радиоэлектроника». – 1988. – Т. 31. – № 6. – С. 64–72.

70. *Москалюк В. А.* Моделирование малощумящего режима субмикронного ПТШ / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Изв. ВУЗов. Сер. «Радиоэлектроника». – 1993. – Т. 36. – № 3. – С. 57–63.

71. *Москалюк В. А.* Моделирование малощумящего режима субмикронного полевого транзистора / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды XII Всесоюз. конф. по твердотельной электронике СВЧ. – К. – 1990. – С. 63–64.

72. Москалюк В. А. О роли подложки в субмикронных полевых транзисторах / В. А. Москалюк, В. В. Минаков, В. И. Тимофеев // Труды III Всесоюз. конф. «Математическое моделирование физических процессов в полупроводниках и приборах». – Вильнюс. – 1989. – С. 130–133.

73. Москалюк В. А. Моделирование субпорогового режима арсенидгаллиевых полевых транзисторов с барьером Шоттки / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды II республик. совещания «Численные методы и средства проектирования и испытания элементов твердотельной электроники». – Таллин. – 1989. – С. 89–91.

74. Москалюк В. А. Особенности работы и моделирования субмикронных полевых транзисторов в малощумящем режиме / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды междунар. семинара «Актуальные вопросы разработки и производства средств приема спутникового телевидения». – Севастополь. – 1990. – С. 18.

75. Москалюк В. А. Моделирование схемных параметров полевого СВЧ транзистора / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Автоматизация проектирования в электронике. – 1987. – Т. 36. – С. 3–11.

76. Сигорский В. П. Алгоритмы анализа электронных схем / В. П. Сигорский, А. И. Петренко. – Изд. 2-е. – М. : Сов. радио, 1976. – 608 с.

77. Жалуд В. Шумы в полупроводниковых устройствах / В. Жалуд, В. Н. Кулешов; под ред. А. К. Нарышкина. – М. : Сов. радио, 1977. – 416 с.

78. Щепеткин Ф. В. Шумовые свойства транзисторного усилителя дециметрового диапазона / Ф. В. Щепеткин, Ю. С. Данич // Электросвязь. – 1973. – № 2. – С. 60–64.

79. Москалюк В. А. Особенности моделирования субмикронных арсенидгаллиевых полевых транзисторов для цифровых ИС / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды II республик. совещания «Численные методы и средства проектирования и

испытания элементов твердотельной электроники». – Таллин, 1989. – С. 86–88.

80. Москалюк В. А. Моделирование субмикронных арсенидгаллиевых полевых транзисторов для сверхскоростных интегральных схем / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды I Всесоюз. конф. «Компьютерные методы исследования проблем теории и техники передачи дискретных сигналов по радиоканалам.» – М. : Радио и связь, 1990. – С. 59–60.

81. Москалюк В. А. Модели полевых транзисторов для сверхскоростных и сверхвысокочастотных интегральных схем / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды всесоюз. конф. «Математическое моделирование в энергетике». – К. – 1990. – С. 161–162.

82. Москалюк В. А. Физико-топологическое моделирование ПТШ для режима большого сигнала / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды междунар. конф. «Проблемы автоматизированного моделирования в электронике.» – К. – 1994. – С. 195–199.

83. Москалюк В. А. О возможностях квазидвумерной модели для нелинейного моделирования субмикронных арсенидгаллиевых ПТШ / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды XII Всесоюз. конф. по твердотельной электронике СВЧ. – К. – 1990. – С. 18–19.

84. Тимофеев В. И. Идентификация параметров субмикронных ПТШ для сверхбыстродействующих интегральных схем / В. И. Тимофеев // Труды междунар. семинара «Теория идентификации нелинейных динамических объектов». – Трговиште (Болгария). – 1990. – С. 30–31.

85. Москалюк В. А. Физико-топологические модели ПТШ для режима большого сигнала / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Труды всерос. конф. с междунар. участием «Разработка и применение САПР ВЧ и СВЧ электронной аппаратуры.» – Владимир. – 1994. – С. 105–106.

86. *Liou L.L.* Thermal effects on the characteristics of AlGaAs/GaAs heterojunction bipolar transistors using two-dimensional numerical simulation / L. L. Liou, J. L. Ebel, C. I. Huang // IEEE Transactions on electron devices. – 1993. – Vol. 40. – N 1. – P. 35–43.

87. *Тимофеев В. И.* Двумерное численное моделирование субмикронных полевых структур / В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 2004. – № 22. – С. 137–140.

88. *Григорук А. А.* Анализ переходных процессов в арсенид-галлиевых структурах с распределенными параметрами / А. А. Григорук, Н. В. Приходько, В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 1998. – № 4. – С. 359–361.

89. *Григорук А. А.* Сверхширокополосные преобразователи миллиметрового диапазона для систем оптоволоконной связи / А. А. Григорук, Н. В. Приходько, В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 1999. – № 6. – Т. 2 – С. 256–264.

90. *Приходько Н. В.* Численный анализ полевых структур с распределенными параметрами во временной области / Н. В. Приходько, В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 2000. – № 8. – С. 173–174.

91. *Chu Q.-X.* Transient analysis of microwave circuits based on time-domain characteristic models / Q.-X. Chu, Y.-Pat Lau, F.-Y. Chang // IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques. – 1998. – Vol. 46. – N 8. – P. 1097–1104.

92. *Григорук А. А.* Верификация нелинейных моделей электронных цепей СВЧ на классе жестко-устойчивых численных методов / А. А. Григорук, В. И. Тимофеев // Изв. ВУЗов. Сер. «Радиоэлектроника». – 1998. – № 1. – С. 41–51.

93. *Москалюк В. А.* Секционированная модель полевого СВЧ транзистора, учитывающая распределенные эффекты / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Автоматизация проектирования в электронике. – 1986. – Вып. 33. – С. 93–97.

94. *Тимофеев В. И.* Шумы полевого СВЧ транзистора с топологическими неоднородностями / В. И. Тимофеев,

В. В. Андриец // Вестн. Киев. политех ин-та. Сер. «Радиоэлектроника». – 1987. – Вып. 23. – С. 1671–1708.

95. Штёрмер Х. Дробный квантовый эффект Холла. Нобелевская лекция. Стокгольм, 10 декабря 1998 г. / Х. Штёрмер // Успехи физических наук. – 2000. – Т. 170. – № 3. – С. 303–319.

96. Minura T. Jap. Appl. Phys / T. Minura, S. Hiyamizu, T. Fujii et al. – Vol. 19. – N 5. – 1980. – P. L225.

97. Lee J. S. Reduction of current collapse in AlGaIn/GaN heterostructure FETs / J. S. Lee, J. W. Kim, J. H. Lee et al. // Electron. Lett. – 2003. – Vol. 39. – N 9. – P. 750–752.

98. Delagebeaudeuf D. Linh Metal-(n) GaAlAs-GaAs two-dimensional electron gas FET / D. Delagebeaudeuf, T. Nuyen // IEEE Trans. on Electron Dev. – 1982. – Vol. 29. – N 6. – P. 955–960.

99. Lee K. Design and fabrication of high transconductance modulation-doped (Al, Ga)As/GaAs FETs / K. Lee, M. S. Shur // J. of Vac. Sci. Technol. B. – 1983. – Vol. 1. – N 2. – P. 186–189.

100. Yoshida J. Analysis of high electron mobility transistors based on two-dimensional numerical model / J. Yoshida, M. Kazata // IEEE Trans. on Electron Dev. Lett. – 1984. – Vol. 5. – N 12. – P. 508–510.

101. Widiger D. Y. Two dimensional transient simulation of an idealised high electron mobility transistor / D. Y. Widiger, I. C. Kizilyalli, K. Hess et. al. // IEEE Trans. on Electron Dev. – 1985. – Vol. 32. – N 6. – P. 1092–1102.

102. Минаков В. Моделирование гетероструктурных полевых транзисторов методом частиц / В. В. Минаков, В. А. Москалюк // Электронная техника. Сер. I «Электроника СВЧ». – 1989. – Вып. 2 (416). – С. 29–36.

103. Adachi Sadao. GaAs, AlAs and AlGaAs material parameters for use in research and devices applications / Sadao Adachi // J. Appl. Phys. – 1985. – Vol. 58. – N 3. – P. R1–R29.

104. Минаков В. В. Моделирование гетероструктурных полевых транзисторов с односторонним и двойным барьером методом частиц / В. В. Минаков, В. А. Москалюк // Автоматизация

проектирования в электронике. Сер «Техника». – Вып. 41. – С. 44–50.

105. *Shur M. S.* Low Ballistic Mobility in Submicron HEMT's / M. S. Shur // IEEE Electron Device Letters. – Vol. 23. – N 9. – 2002. – P. 511–513.

106. *Kasemsuwan V.* A Microwave Model for High Electron Mobility Transistors / V. Kasemsuwan, A. Nikali // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – Vol. 45. – N 3. – 1997. – P. 420–427.

107. *Rudge P.* Investigation Into Intermodulation Distortion in HEMT's Using a Quasi-2-D Physical Model / P. Rudge, R. Miles, M. Steer, C. Snowden // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – Vol. 49. – N 12. – 2001. – P. 2315–2320.

108. *Verzelesi G* Experimental and numerical assessment of gate-lag phenomena in AlGaAs-GaAs heterostructure field-effect transistors (FETs) / G. Verzelesi, A. Mazzanti, A. Basile, A. Boni, E. Zanoni, C. Canali // IEEE Transactions on Electron Devices. – Vol. 50. – N 8. – 2003. – P. 1733–1740.

109. *Москалюк В. А.* Расчет релаксационных параметров GaAs в сильных полях / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев, А. В. Иващук // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2003. – N 3. – С. 61–64.

110. *Morton C.* Comparison of quasi-2D and ensemble Monte-Carlo simulations for deep submicron HEMTs / C. Morton, S. Rosa, C. Snowden // Proc. MTT-S International Microwave Symposium Digest. – 1998. – Vol. 1. – P. 153–156.

111. *Akturk A.* Quantum Modelling and Proposed Design of CNT-Embedded Nanoscale MOSFET's / A. Akturk, G. Pennington, N. Goldsman // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2005. – Vol. 52. – N 4. – P. 577–584.

112. *Chu R.* AlGaN-GaN Double-Channel HEMTs / R. Chu, Y. Zhou, J. Liu et al. // IEEE Transactions On Electron Devices. – 2005. – Vol. 52. – N 4. – P. 438–445.

113. *Sadofyev Yu. G.* New approach to the independent ohmic contact formation in the structures with two parallel isotype

quantum wells / Yu. G. Sadofyev, S. E. Yevstigneev, Yu. V. Kopaev et al. // J. Vac. Sci. Technol. N B.2000. – N 18 (3). – P. 1668–1671.

114. Тимофеев В. И. Моделирование нестационарных эффектов дрейфа в субмикронных гетеротранзисторах с двумя каналами / В. И. Тимофеев, Амини Мохсен // Вісн. держ. ун-ту інформац.-комунікац. технологій. – 2005. – Т. 3 – № 3–4. – С. 143–146.

115. Тимофеев В. И. Нестационарный дрейф электронов в субмикронных гетеротранзисторах с двумя гетеропереходами / В. И. Тимофеев, Амини Мохсен // Электроника и связь. – 2006. – Ч. 1. – С. 5–8.

116. Timofeyev V. I. Non-stationary Drift Of Electrons in Submicron High Electron Mobility Transistor with two Heterojunctions / V. I. Timofeyev, M. Amini, E. M. Faleeva // Electronics and Electrical Engineering. – 2007. – N 4 (76). – P. 33–36.

117. Duh K. H. G. A super low-noise 0,1 micron T-gate InAlAs-InGaAs-InP HEMT / K. H. G. Duh et al. // IEEE Microwave Guided Wave Letter. – 1991. – N 5. – P. 114–116.

118. Hung D. H. DC and transmission line models for s high electron mobility transistor / D. H. Hung, C. Lin // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 1989 – Vol. 37. – N 9. – P. 1361–1369.

119. Chang C. S. Analytical model for HEMT's using new velocity – field dependence / C. S. Chang, H. R. Fetterman // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1987. – Vol. 34. – P. 1456–1462.

120. Chey A. J. An Analytical Current- Voltage Characteristics Model for High Electron Mobility Transistor Based on Nonlinear Charge- Control Formulation / A. J. Chey, H. K. Walter // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1989. – Vol. 37. – N 4. – P. 908–919.

121. Мокеров В. Г. Новый гетероструктурный транзистор на квантовых точках / В. Г. Мокеров, Ю. В. Фёдоров, Л. Э. Великовский, М. Ю. Щербакова // Докл. РАН. – 2000. – Т. 375. – № 6. – С. 754–747.

122. Тимофеев В. И. Моделирование транзистора со встроенными квантовыми точками / В. И. Тимофеев, Е. М. Фалеева // 16-я Междунар. крымская конф. «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». – 11–14 сентября 2006 г., Севастополь. – С. 222–224.

123. Тимофеев В. И. Численное моделирование субмикронных гетеротранзисторов с квантовыми точками на основе соединения нитрида галлия / В. И. Тимофеев, Е. М. Фалеева // Электроника и связь. – 2007. – Тематич. выпуск. – Ч. 1. – С. 62–65.

124. Карпович И. А. Квантовая инженерия: самоорганизованные квантовые точки / И. А. Карпович // Соросовский образовательный журнал. – 2001. – Т. 7. – № 11. – С. 102–108.

125. Брунков П. Н. Емкостная спектроскопия электронных уровней в квантовых точках InAs в матрице GaAs / П. Н. Брунков, С. Г. Конников, В. М. Устинов и др. // Физика и техника полупроводников. – 1996. – Т. 30. – № 5. – С. 924–933.

126. Пожела Ю. К. Большое повышение максимальной дрейфовой скорости электронов в канале полевого гетеротранзистора / Ю. К. Пожела, В. Г. Мокеров // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40. – № 3. – С. 362–366.

127. Ландау Л. Д. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1989. – 766 с.

128. Драгунов В. П. Основы наноэлектроники : учеб. пособие / В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин. – М. : Логос, 2006. – 496 с.

129. Смирнов М. Б. Численное моделирование температурной зависимости спектров фотолюминесценции квантовых точек InAs/GaAs / М. Б. Смирнов, Б. В. Талалаев, С. В. Новиков и др. // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49. – Вып. 6. – С. 1126–1131.

130. Поздняков В. Д. Расчет вольт-амперных характеристик симметричных двухбарьерных резонансно-туннельных структур на основе арсенида галлия с учетом процессов разрушения когерентности электронных волн в квантовой яме / В. Д. Поздняков,

В. М. Борздов, Ф. Ф. Комаров // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, 2004. – Т. 38. – Вып. 9. – С. 1097–1100.

131. *Timofeyev V. I.* Model of Heterotransistor with Quantum Dots / V. I. Timofeyev, E. M. Faleeva // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 2010. – Vol. 13. – N 2. – P. 186–188.

132. Тимофеев В. И Моделирование двухканального гетеротранзистора с квантовыми точками / В. И. Тимофеев, Е. М. Фалеева // СВЧ техника и телекоммуникационные технологии: 20-я Междунар. крымская конф. – 13–17 сентября 2010 г. – Севастополь: Вебер, 2010. – С. 846–847.

133. Мокеров В. Г. Гетероструктурный транзистор на квантовых точках с повышенной максимальной дрейфовой скоростью электронов / В. Г. Мокеров, Ю. Пожела, К. Пожела, В. Юцене // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, 2006. – Т. 40. – Вып. 40. – С. 367–371.

134. *Shi Chang Zhong.* AlGa_N/Ga_N HEMT with over 110 W Output Power / Chang Zhong Shi, Chen Tangsheng, Ren Chunjiang et al. // Proceedings of the 3rd European Microwave Integrated Circuits Conference. – October, 2008. – Amsterdam, The Netherlands. – P. 91–94.

135. *Eizo Mitani.* An 800-W AlGa_N/Ga_N HEMT for S-band High-Power Application / Mitani Eizo, Aojima Makoto, Maekawa Arata et al. // CS MANTECH Conference. – May 14–17, 2007. – Austin, Texas, USA. – P. 213–216.

136. Захаров А. Л. Расчет тепловых параметров полупроводниковых приборов / А. Л. Захаров, Е. И. Асвадурова. – М. : Радио и связь, 1983. – 184 с.

137. Могилевский В. М. Теплопроводность полупроводников / В. М. Могилевский, А. Ф. Чудновский. – М. : Наука, 1972. – 536 с.

138. Теплопроводность твердых тел: справочник / А. С. Охотин, Р. П. Боровикова, Т. В. Нечаева, А. С. Пушкарский; под ред. А. С. Охотина. – М. : Энергоатомиздат, 1984. – 320 с.

139. Семеновская Е. В. СВЧ методы измерения температурных полей / Е. В. Семеновская, В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 2000. – № 8. – Т. 2. – С. 263–265.

140. Прокопов В. Г. Моделирование мощных полевых транзисторов. Ч. 1. Тепловой режим / В. Г. Прокопов, Г. Т. Тариелашвили, Ю. В. Шеренковский, В. Л. Юрчук // Сб. докл. междунар. науч.-техн. конф. «Проблемы физической и биомедицинской электроники», 18–20 мая 1996 г. – К. – С. 240–244.

141. Москалюк В. А. Моделирование мощных полевых транзисторов. Ч. 2. Электрический режим / В. А. Москалюк, Г. Т. Тариелашвили, В. И. Тимофеев // Сб. докл. междунар. науч.-техн. конф. «Проблемы физической и биомедицинской электроники», 27–30 мая 1996 г. – К. – С. 366–369.

142. Cai Q. HBT High-Frequency Modeling and Integrated Parameter Extraction / Q. Cai, J. Gerber, U. Rohde, T. Daniel // IEEE Transaction on Electron Devices. – 1997. – Vol. 45. – N 12. – P. 2493–2502.

143. Семеновская Е. В. Физико-топологическое моделирование теплового режима мощного субмикронного полевого транзистора СВЧ / Е. В. Семеновская, Н. В. Приходько, В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 2000. – № 9. – С. 140–142.

144. Семеновская Е. В. Моделирование теплового режима в субмикронных транзисторах с гетероселективным легированием // Электроника и связь. – 2001. – № 13. – С. 32–36.

145. Семеновская Е. В. Моделирование тепловых процессов в транзисторах с гетероселективным легированием / Е. В. Семеновская, В. И. Тимофеев // Труды междунар. конф. «Физика и технология тонких пленок». – Ивано-Франковск. – 2003. – Т. 2. – С. 127–128.

146. Семеновская Е. В. Схемотехническое моделирование тепловых эффектов и эффекта саморазогрева в субмикронных гетероструктурных транзисторах / Е. В. Семеновская, В. И. Тимофеев // Труды 7-го Междунар. форума «Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке». – Харьков. – 2003. – С. 81.

147. Семеновская Е. В. Анализ моделей и тепловых режимов гетеробиполярных субмикронных транзисторов / Е. В. Семеновская, В. И. Тимофеев, Н. В. Приходько // Электроника и связь. – 2001. – № 10. – С. 133–136.

148. Mahesh B. Patil New discretization scheme for two-dimensional semiconductor device simulation on triangular grid / B. Mahesh // IEEE Transactions on computer-aided design of integrated circuits and systems. – 1998. – Vol. 17. – N 11. – P. 1160–1165.

149. Тимофеев В. И. Шумовые свойства субмикронных гетеробиполярных транзисторов / В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 2002. – № 16. – С. 112–115.

150. Тимофеев В. И. Моделирование процессов токопереноса в субмикронных гетеробиполярных транзисторах / В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 2004. – № 23. – С. 57–60.

151. Bester Y. InAlAs/InGaAs HBTs with Simultaneously High Values of F_t and F_{max} for Mixed Analog/Digital Applications / Y. Bester, D. Scott, D. Mensa et al. // IEEE Electron Device Letters. – 2001. – Vol. 22. – N 2. – P. 56–58.

152. Liou L. L. Thermal Effects on the Characteristics of AlGaAs/GaAs Heterojunction Bipolar Transistors Using Two-Dimensional Numerical Simulation / L. L. Liou, J. Ebel, C. Huang // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1993. – Vol. 40. – N 1. – P. 35–43.

153. Benvenuti A. A Thermal-Fully Hydrodynamic Model for Semiconductor Devices and Applications to III-V HBT Simulation / A. Benvenuti, W. M. Coughran, M. R. Pinto // IEEE Transactions on electron devices. – 1997. – Vol. 44. – N 9. – P. 1349–1359.

154. Gao G.-B. Thermal design studies of high-power heterojunctions bipolar transistors / G.-B. Gao, M.-Z. Wang, X. Gui, H. Morkoc // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1989. – Vol. 36. – N 5. – P. 854–863.

155. *Marshak A. H.* Transport equations for highly doped devices and heterostructure / A. H. Marshak // Solid-State Electronics. – 1987. – Vol. 30. – P. 1089–1093.

156. *Samelis A.* Analysis of the large-signal characteristics of power heterojunction bipolar transistors exhibiting self-heating effects / A. Samelis, D. Pavlidis // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 1997. – Vol. 45. – N 4. – P. 534–541.

157. *Тимофеев В. И.* Анализ разогревных эффектов в субмикронных гетеробиполярных транзисторах / В. И. Тимофеев // Вiсн. Черкаського держ. технолог. ун-ту. Сер. «Радіотехніка і приладобудування». – 2004. – № 4. – С. 72–78.

158. *Twynam J. K.* Thermal stabilization of AlGaAs/GaAs power HBT's using $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ emitter ballast resistors with high thermal coefficient of resistance / J. K. Twynam, M. Yagura, K. Kishimoto et al. // Solid-State Electron. – 1995. – Vol. 9. – N 3. – P. 1657–1661.

159. *Liu W.* The use of base ballasting to prevent the collapse of current gain in AlGaAs/GaAs heterojunction bipolar transistors / W. Liu, A. Khatibzadeh, J. Sweder, H. Chau // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1996. – Vol. 43. – N 2. – P. 245–251.

160. *Gao G.* Emitter ballasting resistor design for current handling capability of AlGaAs/GaAs power heterojunction bipolar transistors / G. Gao, M. Unlu, D. Blackburn // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1991. – Vol. 38. – N 2. – P. 185–196.

161. *Zhang Q.* A new large signal HBT model / Q. Zhang, H. Hu, J. Sitch et al. // IEEE Trans. Microwave Theory Tech. – 1996. – Vol. 44. – N 5. – P. 2001–2009.

162. *Zhu Y.* Self-heating effect compensation in HBTs and its analysis and simulation / Y. Zhu, J. K. Twynam, M. Yagura // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2001. – Vol. 48. – N 11. – P. 2640–2645.

163. *Andlerstein M. G.* Thermal stability ballasted HBT's / M. G. Andlerstein // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1998. – Vol. 45. – N 2. – P. 1653–1655.

164. Тимофеев В. И. Электротепловой анализ монолитных интегральных схем на основе соединений A_3B_5 / В. И. Тимофеев, Е. В. Семеновская // Сучасні інформаційно-комунікаційні технології /COMINFO`2008/. – Лівадія. – 2008. – С. 111–11

165. Семеновская Е. В. Электротепловой анализ субмикронных гетероструктур / Е. В. Семеновская, В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 2007. – № 1. – С. 57–61.

166. Wei C.-J. Large-signal modeling of self-heating, collector, transit-time and RF-breakdown effects in power HBT's / C.-J. Wei, J. C. M. Hwang, W.-J. Ho, J. A. Higgins // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 1996. – Vol. 44. – N 12. – P. 2641–2646.

167. Green B. M. High-power broad-band AlGaN/GaN HEMT MMICs on SiC substrates / B. M. Green, V. Tilak, H. Kim et al. // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2001. – Vol. 49. – N 12. – P. 2486.

168. Huber A. Noise model of InP-InGaAs SHBT's for RF circuit design / A. Huber, D. Huber, C. Bergamaschi et al. // IEEE Transactions on microwave theory and techniques. – 2002. – Vol. 50. – N 7. – P. 1675–1682.

169. Liou J. J. Bias, Frequency and Area Dependencies of High Frequency Noise in AlGaAs/GaAs HBT's / J. J. Liou, T. J. Jenkins, L. L. Liou et al. // IEEE Transactions on electron devices. – 1996. – Vol. 43. – N 1. – P. 116–122.

170. Шахнович И. Твердотельные СВЧ-приборы и технологии. Состояние и перспективы / И. Шахнович // ЭЛЕКТРОНИКА: НТБ. – 2005. – № 5. – С. 58–64.

171. Wayne R. Berger. RF-LDMOS: A Silicon-Based, High Power, High Efficiency Linear Power Amplifier Technology / Berger Wayne R. et al. // 2000 GaAs MANTECH Conf. Dig. Ppr. – 2000. – 1987 p.

172. Philips Semiconductors: офіційний сайт [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://www.semiconductors.philips.com>

173. Wood, Pengely, Dunleavy, Clausen, Weller and Emmadi. New LDMOS Model Delivers Powerful Transistor Library–Part 2:

Library application // High Frequency Electronics. – November, 2004. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://www.highfrequencyelectronics.com/Archives/Archives2004.shtml>.

174. *Curtice, Dunleavy, Clausen and Pengelly*. New LDMOS Model Delivers Powerful Transistor Library–Part 1: The CMC Model // High Frequency Electronics. – October, 2004 [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://www.highfrequencyelectronics.com/Archives/Archives2004.shtml>

175. Circuits and System, 2006. MIXDES 2006. Proceedings of the International Conference. – June, 2006. – 987 p.

176. Технология мощных СВЧ LDMOS-транзисторов для радарных передатчиков L-диапазона и авиационных применений. Компоненты и технологии. – № 10. – 2007. – С. 14–16.

177. *Okumura H*. Present Status and Future Prospect of Widegap Semiconductor High-Power Devices // Japanese Journal of Applied Physics. – Vol. 45. – N 10A. – 2006. – P. 7565–7586.

178. www.eetimes.com/showArticle.jhtml?articleID=190300189.

179. *Лебедев А*. SiC электроника. Прошлое, настоящее, будущее / А. Лебедев, С. Сбруев // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. – № 5. – 2006. – С. 28.

180. *Абрамов И. И*. Комбинированная модель резонансно-туннельного диода / И. И. Абрамов, И. А. Гончаренко, Н. В. Коломейцева // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39. – Вып. 9. – С. 1138–1145.

181. *Блохинцев Д. И*. Основы квантовой механики: учебное пособие / Д. И. Блохинцев. – Изд. 5-е перераб. – М. : Наука, 1976. – 664 с.

182. *Иогансен Л. В*. О возможности резонансного прохождения электронов в кристаллах через системы барьеров / Л. В. Иогансен // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1963. – Т. 45. – Вып. 2. – С. 207–213.

183. *Йогансен Л. В.* Тонкопленочные электронные интерферометры / Л. В. Йогансен // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1965. – Т. 86. – Вып. 1. – С. 175–179.

184. *Chang L. L.* Resonant tunneling in semiconductor double barriers / L. L. Chang, L. Esaki, R. Tsu // Appl. Phys. Lett. – 1974. – Vol. 24. – P. 593–595.

185. *Shewchuk T. J.* Resonant tunneling oscillations in a GaAs-AlxGa1-xAs heterostructure at room temperature / T. J. Shewchuk, P. C. Chapin, P. D. Coleman // Applied Physics Letters. – 1985. – Vol. 46. – P. 508–510.

186. *Luryi S.* Mechanism of operation of double-barrier resonant-tunneling oscillators / S. Luryi // Electron Devices Meeting, 1985 International. – 1985. – Vol. 31. – P. 666–669.

187. *Boykin T. B.* Resonant tunneling diodes with emitter prewells / T. B. Boykin, R. C. Bowen, G. Klimeck // Appl. Phys. Lett. – 1999. – Vol. 75. – P. 1302–1304.

188. *Герасимов С. М.* Физические основы электронной техники / С. М. Герасимов, М. В. Белоус, В. А. Москалюк. – К. : Вища шк., 1981. – 368 с.

189. *Хьюеу Н. В.* Основы метода вторичного квантования / Нгуен Ван Хьюеу. – М. : Энергоатомиздат, 1984. – 208 с.

190. *Tsu R.* Tunneling in a finite superlattice / R. Tsu, L. Esaki // Appl. Phys. Letters. – 1973. – Vol. 22. – P. 562–564.

191. *Saleh B. E. A.* Fundamentals of photonics / B. E. A. Saleh, M. C. Teich. – New Jersey: John Wiley & Sons Inc, 2007. – 1178 p.

192. *Araki K.* Analysis of barrier transmission in resonant tunneling diodes / Kinichiro Araki // Journal of Applied Physics. – Vol. 62. – N 3. – P. 1059–1069.

193. *Тагер А. С.* Размерные эффекты в субмикронных полупроводниковых структурах и перспектива их использования в электронике СВЧ / А. С. Тагер // Электронная техника. Сер. «Электроника СВЧ». – 1987. – Вып. 9. – С. 21–33.

194. *Moskaliuk V.* Simplified analytical model of resonant-tunneling diode / V. Moskaliuk, A. Fediai // Abstracts Proceedings

of 32nd International Spring Seminar on Electronics Technology "ISSE 2009" . – Brno: Czech Republic, 2009. – P. 1–5.

195. Москалюк В. А. Метод нахождения резонансных уровней энергии при многозонном моделировании гетероструктур / В. А. Москалюк, А. В. Федяй // Техника и приборы СВЧ. – 2011. – № 1. – С. 43–48.

196. Менский М. Б. Квантовые измерения и декогеренция / М. Б. Менский. – М. : Физматлит, 2001. – 232 с.

197. Brennan K. F. Theory of resonant tunneling in a variably spaced multiquantum well structure: An Airy function approach / K. F. Brennan, C. J. Summers // J. Appl. Phys. – 1987. – Vol. 61. – P. 614–623.

198. Федяй А. В. Моделирование резонансно-туннельного диода методом функций Эйри / А. В. Федяй, И. С. Тисный // Научн.-техн. сб. «Электроника и связь»; тематич. вып. «Электроника и нанотехнологии». – Ч. 1. – 2009. – № 2–3. – С. 19–21.

199. Мар'єнков В. В. Моделювання РТД з параболічними потенціальними ямами: бакалаврська робота [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://phbme.ntu-kpi.kiev.ua/~fedayay/2b.pdf>.

200. Самарский А. А. Введение в численные методы / А. А. Самарский. – М. : Наука, 1987. – 271 с.

201. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем / А. А. Самарский. – М. : Наука, 1971. – 553 с.

202. Lent C. S. The quantum transmitting boundary method / C. S. Lent, D. J. Kirkner // Journal of Applied Physics. 1990. – Vol. 67. – P. 6353–6359.

203. Хокни Р. Численное моделирование методом частиц / Р. Хокни, Дж. Иствуд; пер. с англ. – М. : Мир, 1987. – 640 с.

204. Москалюк В. О. Фізика електронних процесів: навч. посіб. Ч. I. / В. О. Москалюк. – К. : «Політехніка», 2004. – 148 с.

205. Gummel H. K. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculation / H. K. Gummel // IEEE Transactions on Electron Devices – 1964. – Vol. 11. – P. 455–465.

206. *Sun J. P.* Resonant tunneling diodes: models and properties / J. P. Sun, R. K. Mains, G. I. Haddad // Proc. of IEEE. – 1998. – Vol. 86. – P. 641–661.

207. *Федяй А. В.* Моделі резонансно-тунельних діодів (аналітичний огляд). Когерентні моделі / А. В. Федяй // Наук.-техн. журн. «Електроника и связь» – 2007. – № 4. – С. 17–29.

208. *Федяй А. В.* Моделі резонансно-тунельних діодів (аналітичний огляд). Кінетичні моделі / А. В. Федяй // Наук.-техн. журн. «Електроника и связь». – 2007. – № 5. – С. 11–16.

209. *Anantram M. P.* Modeling of Nanoscale Devices / M. P. Anantram, M. S. Lundstrom, D. E. Nikonov // Proceedings of the IEEE. – 2008. – Vol. 96. – P. 1511–1550.

210. *Москалюк В. О.* Проблемы моделирования компонентов наноэлектроники на примере резонансно-туннельного диода / В. О. Москалюк, А. В. Федяй // Научн.-техн. журн. «Вісник ДУІКТ». – 2009. – Т. 7. – № 4. – С. 424–429.

211. *Buttiker M.* Coherent and sequantial tunneling in double barrier / M. Buttiker // IBM. J. Res. Develop. – 1988. – Vol. 32. – P. 63–75.

212. *Zohta Y.* Improved optical model for resonant tunneling diode / Y. Zohta, T. Tanamoto // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74. – P. 6996–6998.

213. *Sun J. P.* Self-consistent scattering calculation of Resonant Tunneling Diode Characteristics / J. P. Sun, G. I. Haddad // VLSI Design. – 1998. – Vol. 6. – P. 83–86.

214. *Mains R. K.* Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling diode modeling / R. K. Mains, J. P. Sun, G. I. Haddad // Appl. Phys. Lett. – 1988. – Vol. 55. – P. 371–373.

215. *Diamond S. K.* Fabrication of 200-GHz fmax Resonant-Tunneling Diodes for Integrated Circuit and Microwave Applications / S. Diamond, E. Ozbay, M. J. W. Rodwell et al. // IEEE Electron device letters. – 1989. – Vol. 10. – N 3. – P. 104–106.

216. *Wolak E.* The design of GaAs/AlAs resonant tunneling diodes with peak current densities over 2×10^5 A cm⁻² / E. Wolak,

E. Ozbay, B. G. Park et al. // J. Appl. Phys. – 1991. – Vol. 69. – P. 3345–3350.

217. *Tsu R.* Superlattice to nanoelectronics / Ralf Tsu // London: Elsveir, 2005. – 325 p.

218. *Martin A. D.* Observation of intrinsic tristability in a resonant tunneling structure / A. D. Martin; M. L. F. Lerch; P. E. Simmonds; L. Eaves // Applied Physics Letters . – 1994. – Vol. 64. – P. 1248–1250.

219. *Wei T.* Capacitance and hysteresis study of AlAs/GaAs resonant tunneling diode with asymmetric spacer layers / T. Wei, S. Stapleton // J. Appl. Phys. – 1995. – Vol. 77. – P. 4071–4076.

220. *Караваев Г. Ф.* «Сверхрешеточная» модель плавной гетерограницы GaAs/AlAs (001) / Г. Ф. Караваев, С. Н. Гриняев // Физика твердого тела. – 2006. – Т. 48. – Вып. 5. – С. 893–901.

221. *Baro M. A.* 1D coupled Schrodinger drift-diffusion model including collisions / M. Baro, N. Ben Abdallah, P. Degond, A. El Ayyadi // Journal of Compautional Physics. – 2005. – Vol. 203. – P. 129–153.

222. *Москалюк В. А.* Моделирование артефактов на ВАХ резонансно-туннельного диода / В. А. Москалюк, А. В. Федяй // 21-я Междунар. конф. «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». – Севастополь. – 12–16 сентября 2011 г. – С. 787–788.

223. *Bowen R. C.* Quantitative simulation of resonant tunneling diode / R. C. Bowen, G. Klimeck, R. K. Lake, W. R. Frensley, T. Moise // J. Appl. Phys. – 1997. – Vol. 81. – P. 3207–3213.

224. *Schulman J. N.* Extension of Tsu-Esaki model for effective mass effects in resonant tunneling / J. N. Schulman // Appl. Phys. Lett. – 1998. – Vol. 72. – P. 2829–2831.

225. *Vurgaftman I.* Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys / I. Vurgaftman, J. R. Meyer // J. Appl. Phys. – 2001. – Vol. 89. – N 11. – P. 5815–5862.

226. Новые полупроводниковые материалы: Характеристики и свойства [Электронный архив]. – Режим доступа: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/rintroduction.html>.

227. *Stovneng A.* Multiband tight-binding approach to tunneling in semiconductor heterostructures: Application to Γ X transfer in GaAs / A. Stovneng, P. Lipavsky // Physical Review B. – 1994. – Vol. 49. – P. 16494–16504.

228. *Liu H. C.* Resonant tunneling through single layer heterostructure / H. C. Liu // Appl. Phys. Lett. – 1987. – Vol. 51. – P. 1019–1021.

229. *Sun J. P.* A self-consistent model of Γ -X mixing in GaAs/AlAs/GaAs quantum well using quantum transmitting boundary method / J. P. Sun, R. K. Mains, K. Yang, G. I. Haddad // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74. – P. 5053–5060.

230. *Васько Ф. Т.* Электронные состояния и оптические переходы в полупроводниковых гетероструктурах / Федор Трофимович Васько. – К. : Наук. думка, 1993. – 181 с.

231. *Абрамов И. И.* Комбинированная двухзонная модель резонансно-туннельного диода / И. И. Абрамов, И. А. Гончаренко // Физика и техника полупроводников. – 2007. – Т. 41. № 11. – С. 1395–1400.

232. Резонанси Фано (матеріал з Вікіпедії) [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://ru.wikipedia.org/wiki/Резонанс_Фано.

233. *Evstigneev S. V.* Multiple-barrier resonant tunneling structures for application in a microwave generator stabilized by microstrip resonator / S. V. Evstigneev, A. L. Karuzskii, Yu. A. Mityagin et al. / 8th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology". – St. Petersburg, Russia, June 19–23. – 2000.:2000. – P. 494–497.

234. *Yatskiv R.* Analysis of the resonant tunneling diode with the stepped pre-barrier / R. Yatskiv, J. Voves // Journal of physics: conference series. – 2009. – Vol. 193. – P. 1–4.

235. *Обухов И. А.* Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах / И. А. Обухов. – Севастополь : «Вебер», 2005. – 226 с.

236. *Young J. F.* Effect of circuit oscillations on dc current-voltage characteristics of double barrier resonant tunneling structures / J. F. Young, B. M. Wood, H. C. Liu et al. // Appl. Phys. Lett. – 1988. – Vol. 52. – P. 1398–1400.

237. *Qiu Z. J.* Experimental verification of origin of plateau-like current-voltage characteristics of resonant tunneling diodes / Z. J. Qiu, Y. S. Gui, S. L. Guo et al. // Appl. Phys. Lett. – 2007. – Vol. 4. – P. 1961–1963.

238. *Татарский В. И* Вигнеровское представление квантовой механики / В. И. Татарский // Успехи физических наук. – 1983. – Т. 139. – Вып. 4. – С. 587–619.

239. *Curreli M.* Real-Time, Label-Free Detection of Biological Entities Using Nanowire-Based FETs / M. Curreli, R. Zhang, F. N. Ishikawa, H. K. Chang, R. J. Cote, C. Zhou, M. E. Thompson // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2008 – Vol. 7. – N 6. – P. 651–668.

240. *Galatsis K.* Alternate State Variables for Emerging Nanoelectronic Devices / K. Galatsis, A. Khitun, R. Ostroumov et al. // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. N 1. – P. 66–75.

241. *Tarakeshwar P.* Electrode-Molecule Interface Effects on Molecular Conductance / P. Tarakeshwar, J. J. Palacios, D. M. Kim // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 1. – P. 16–21.

242. *Jung Y. C.* Fabrication and Characterization of Sidewall Defined Silicon-on-Insulator Single-Electron Transistor / Y. C. Jung, K. H. Cho, B. Y. Hong et al. // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2008 – Vol. 7. – N 5. – P. 544–550.

243. *Miyaji K.* Compact Analytical Model for Room-Temperature-Operating Silicon Single-Electron Transistors With Discrete Quantum Energy Levels / K. Miyaji, M. Saitoh, T. Hiramoto // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2006. – Vol. 5. – N 3. – P. 167–173.

244. *Wu. Y.-C.* High-Performance Metal-Induced Lateral-Crystallisation Polysilicon Thin-Film Transistors With Multiple Gates / Y.-C. Wu, T.-C. Chang, P.-T. Liu et al. / IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2006. – Vol. 5. – N 3. – P. 157–162.

245. *Miller L. David.* Observing the Quantization of Zero Mass Carriers in Graphene / D. L. Miller, K. K. Kubista, M. Gregory et al. // Science. – 2009. – Vol. 324. – P. 924–927.

246. *Морозов С. В.* Электронный транспорт в графене / С. В. Морозов, К. С. Новоселов, А. К. Гейм // Успехи физических наук. – 2008. – Т. 178. – № 7. – С. 776–780.

247. *Rana F.* Graphene Terahertz Plasmon Oscillators // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2008. – Vol. 7. – N 1. – P. 91–99.

248. *Ryzhii M.* Injection and population inversion in electrically induced p-n junction in graphene with split gates / M. Ryzhii, V. Ryzhii // J. Appl. Phys. – 2007. – Vol. 101. – P. L151–L153.

249. *Song S.* Analytical Modeling of Field-Induced Interband Tunneling-Effect Transistors and Its Application / S. Song, K. Kim, J. Huh et al. // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2006. – Vol. 5. – N 3. – P. 192–200.

250. *Latessa L.* DFT Modeling of Bulk-Modulated Carbon Nanotube Field-Effect Transistors / L. Latessa, A. Pecchia, Di Carlo A. // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2007. – Vol. 6. – N 1. – P. 13–21.

251. *Bethoux J.-M.* Active Properties of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors Deduced From S-Parameters Measurements / J.-M. Bethoux, H. Happy, A. Siligaris et al. // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2006. – Vol. 5. – N 4. – P. 335–342.

252. *Neophytou N.* Three-Dimensional Electrostatic Effects of Carbon Nanotube Transistors / N. Neophytou, J. Guo, M. Lundstrom // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2006. – Vol. 5. – N 4. – P. 385–392.

253. *Alam K.* Role of Doping in Carbon Nanotube Transistors With Source/Drain Underlaps / K. Alam, R. Lake // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2007. – Vol. 6. – N 6. – P. 652–658.

254. *Lin A.* Threshold Voltage and On-Off Ratio Tuning for Multiple-Tube Carbon Nanotube FETs / A. Lin, N. Patil, K. Ryu at al. // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 1. – P. 4–9.

255. *Patil N.* Circuit-Level Performance Benchmarking and Scalability Analysis of Carbon Nanotube Transistors Circuits / N. Patil, J. Deng, S. Mitra at al. // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 1. – P. 37–45.

256. *Zhang M.* Novel Local Silicon-Gate Nanotube Transistors Combining Silicon-on-Insulator Technology for Integration / M. Zhang, P. C. H. Chan, Y. Chai, Z. K. Tang // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 2. – P. 260–268.

257. *Lee S. H.* A SPICE-Compatible New Silicon Nanowire Field-Effect Transistors (SNWFETs) Model / S. H. Lee, Y. S. Yu, S. W. Hwang at al. // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 5. – P. 643–649.

258. *Zhang M.* Impact of doping segregation on fully depleted Schottky-barrier SOI MOSFETs. / M. Zhang, J. Knoch, Q. T. Zhao, U. Breuer, S. Mantl // Solid-State Electron. – 2006. Vol. 50. – P. 594–600.

259. *Sarto M. S.* New Electron-Waveguide-Based Modeling for Carbon Nanotube Interconnects / M. S. Sarto, A. Tamburrano, M. D'Amore // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 2. – P. 214–225.

260. *Liu Z.* Fabrication and Electrical Characterization of Densified Carbon Nanotube Micropillars for IC Interconnection / Z. Liu, L. Ci, S. Kar, P. M. Ajayan, J.-Q. Lu // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 2. – P. 196–203.

261. *Ngo Q.* Structural and Electrical Characterization of Carbon Nanofibers for Interconnect Via Applications /

Q. Ngo, T. Yamada, M. Suzuki, Y. Ominami, A. M. Cassell, J. Li, M. Meyyappan, C. Y. Yang // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 6. – N 6. – P. 688–695.

262. *Akinwande. D.* Carbon Nanotube Quantum Capacitance for Nonlinear Terahertz Circuits / D. Akinwande, Y. Nishi, H.-S. P. Wong // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 1. – P. 31–36.

263. *Huang Y.* Performance Prediction of Carbon Nanotube Bundle Dipole Antennas / Y. Huang, W.-Y. Yin, Q. H. Liu // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2008. – Vol. 7. – N 3. – P. 331–337.

264. *Слюсар В.* Наноантенны: подходы и перспективы // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. – 2009. – № 2. – С. 58–65.

265. *Burke P. J.* Quantitative Theory of Nanowire and Nanotube Antenna Performance / P. J. Burke, S. Li and Z. Yu // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2006. – Vol. 5. – N 4. – P. 314–334.

266. *Burke. P. J.* An rf circuit model for carbon nanotubes / P. J. Burke // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2003. – Vol. 2. – N 1. – P. 55–58.

267. *Luryi Serge.* Quantum capacitance devices / *Serge Luryi* // Appl. Phys. Letter. – 1988. – N 52. – P. 501–503.

268. *Dresselhaus M. S.* Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties, and Applications / M. S Dresselhaus at al. – Springer-Verlag, 2000. – 531 p.

269. *Огнев А. В.* Спинтроника: физические принципы, устройства, перспективы / А. В. Огнев, А. С. Самардак // Вестник ДВО РАН. – 2006. – № 4. – С. 70–80.

270. *Sinova J.* Universal Intrinsic Spin Hall Effect / J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu at al. // Physical Review Letters. – 2004. – Vol. 92. – P. 126.

271. *Kato Y. K.* Observation of the spin Hall effect in semiconductors / Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard at al. // Science. – 2004. – Vol. 306. – P. 1910.

272. *Stern. P. N.* Current-Induced Polarization and the Spin Hall Effect at Room Temperature / P. N. Stern., S. Ghosh, G. Xiang at al. // *Physical Review Letters*. – 2006. – Vol. 97. – P. 603.

273. *Huang B.* Coherent Spin Transport through a 350 Micron Thick Silicon Wafer / B. Huang, D. J. Monsma, I. Appelbaum // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 99. – P. 209.

274. *Гуляев Ю. В.* Как ток спины переносит. Спинтроника многослойных ферромагнетиков / Ю. В. Гуляев, П. Е. Зильберман, Э. М. Эпштейн // *Успехи физических наук*. – 2008. – № 4. – Т. 178. – С. 433–436.

275. *Гуляев Ю. В.* Спинтроника: обменное переключение ферромагнитных металлических переходов при малой плотности тока / Ю. В. Гуляев, П. Е. Зильберман, А. И. Панас, Э. М. Эпштейн // *Успехи физических наук*. – 2009. – № 4. – С. 359–368.

276. *Ферт А.* Происхождение, развитие и перспективы спинтроники / А. Ферт // *Успехи физических наук*. – 2008. – № 12. – Т. 178. – С. 1336–1348.

277. *Моргунов Р. Б.* Электронный спиновый резонанс в ориентированных нанопроволоках $\text{Ge}_{0.99}\text{Cr}_{0.01}$ / Р. Б. Моргунов, Ф. Б. Мушенок, А. И. Дмитриев и др. // *Физика твердого тела*. – 2009. – Т. 51. – Вып. 8. – С. 1613–1618.

278. *Kawata. Y.* Study of Single-Charge Polarization on a Pair of Charge Qubits Integrated Onto a Silicon Double Single-Electron Transistor Readout / Y. Kawata., Y. Tsuchiya, S. Oda, at al. // *IEEE Transactions On Nanotechnology*. – 2008. – Vol. 7. – N 1. – P. 617–623.

279. *Погосов В. В.* Одноэлектронные эффекты в точечных структурах / В. В. Погосов, Е. В. Васютин, В. П. Курбацкий и др. // *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, 2007. – Т. 5. – С. 39–74.

280. *Bae D.* Low-Cost and Highly Heat Controllable Capacitorless PiFET (Partially Insulated FET) 1T DRAM for

Embedded Memory / D. Bae, S. Kim, Y.-K. Choi // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol. 8. – N 1. – P. 100–105.

281. *Jeong H.* New Capacitorless 1T DRAM Cell: Surrounding Gate MOSFET With Vertical Channel (SGVC Cell) / H. Jeong, K.-W. Song, I. Park et al. // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2007. – Vol. 6. – N 3. – P. 352–357.

Навчальне видання

Москалюк Володимир Олександрович
Тимофєєв Володимир Іванович
Федяй Артем Васильович

Надшвидкодiючі прилади електронiки

Навчальний посiбник

Редагування i коректура Н. В. Мурашової
Комп'ютерне верстання i дизайн обкладинки С. А. Боброва

Темплан 2014 р., поз. 1-2-016

Пiдп. до друку 27.05.2014. Формат 60×84¹/₁₆. Папiр офс. Гарнiтура JournalCTT.
Спосiб друку – офсет. Ум. друк. арк. 30,69. Обл.-вид. арк. 51,04. Зам. № 14-115. Наклад 300 пр.

НТУУ «КПі» ВПі ВПК «Політехніка»
Свідоцтво ДК № 1665 від 28.01.2004 р.
03056, Київ, вул. Політехнічна, 14, корп. 15
тел. (44) 406-81-78